

B Schaub

Frankfurt 1980



Digitized by the Internet Archive
in 2026

UNTERSUCHUNG
DER KRITISCHEN STATIK UND DYNAMIK
VON ISINGSYSTEMEN MIT DEM RENORMIERUNGSGRUPPENVERFAHREN

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik

der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main

von

Bernd Schaub

Frankfurt am Main 1980

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik

der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main

Dekan: Prof. Dr. R. Bass

1. Gutachter: Prof. Dr. H.G.Schuster

2. Gutachter: Prof. Dr.R.J. Jelitto

Tag der mündlichen Prüfung:

20.10.1980



INHALTSVERZEICHNIS

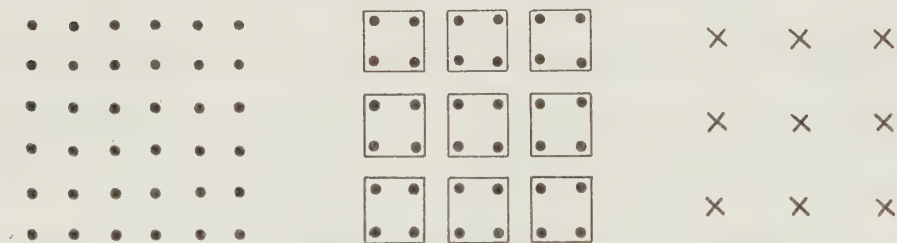
Einleitung

- Teil I : Der Übergang vom uniaxial-dipolaren kritischen Verhalten zum Mean-field Verhalten in LiTbF_4
- Teil II : Das Crossover Verhalten in schwach verunreinigten uniaxialen Ferromagneten mit Dipolwechselwirkung
- Teil III : Bewegungsgleichung und nichtlineare Antwort für einen dipolaren uniaxialen Ferromagneten in der Umgebung des kritischen Punktes
- Teil IV : Nichtlineare kritische Relaxation für ein Ginzburg-Landau Feld gekoppelt an eine erhaltene Dichte

Einleitung und Zusammenfassung

Charakteristisch für Phasenübergänge zweiter Ordnung ist die Existenz einer kritischen Temperatur T_c , unterhalb derer sich das System in einem geordneteren Zustand befinden kann als für $T > T_c$. Ein Maß für diese sich spontan bildende Ordnung ist ein makroskopischer, temperaturabhängiger Ordnungsparameter, der oberhalb von T_c den Wert 0 hat und der unterhalb von T_c stetig anwächst. Bei ferromagnetischen Substanzen, wie Eisen und Nickel, ist der makroskopische Ordnungsparameter die Magnetisierung. Hier ist der sogenannte Kritische Punkt die Curie Temperatur T_c , unterhalb derer eine langreichweitige Ordnung zwischen den Spins im Kristall vorliegt. Andere sehr wichtige und intensiv untersuchte kritische Punkte sind der λ Punkt bei flüssigem Helium und der kritische Punkt der Supraleitfähigkeit bei vielen Metallen. In diesen beiden Fällen sind die entsprechenden Ordnungsparameter die Dichte der superflüssigen Heliummoleküle bzw. die Dichte der supraleitenden Elektronen. Es zeigt sich, daß die Kritischen Phänomene, welche man in den verschiedenen Substanzen beobachtet, in allgemeinen Eigenschaften ähnlich sind. Zunächst zeigt sich in Experimenten, daß viele physikalische Größen, z.B. die magnetische Suszeptibilität in der Umgebung von T_c divergieren. Dies ist ein Ausdruck der Tatsache, daß die Korrelationslänge ξ d.h. der mittlere Durchmesser der geordneten Bereiche am kritischen Punkt divergiert. Die Skalenhypothese sagt aus, daß es die Langreichweitigkeit der Spin-Korrelationen (um beim Beispiel des Ferromagneten zu bleiben), ist, welche zu dem beobachteten singulären Verhalten vieler physikalischen Größen nahe bei T_c führt. Noch präziser ausgedrückt

heißt dies, daß für die Singularitäten die einzige relevante Länge die Korrelationslänge ξ ist, und daß kurzreichweitige Einflüsse unwesentlich sind. Daraus folgt das anschauliche Bild, daß eine große Anzahl einzelner Spins, welche untereinander nur nächste Nachbarwechselwirkung haben und sich in einem Wärmebad befinden, beim Erreichen des Kritischen Punktes sich immer mehr wie ein einziger großer Blockspin verhalten. Dieses Bild führt auch zur Konstruktion der sogenannten Renormierungsgruppe (R.G.) nach Wilson und Kadanoff. Um die Temperaturabhängigkeit der physikalisch interessierenden Größen wie freie Energie, spezifische Wärme, Magnetisierung usw. in der Umgebung von T_c berechnen zu können, verringert man die Freiheitsgrade (z.B. Spinfreiheitsgrade) des Systems durch Zusammenfassung vieler Spins zu Blockspins systematisch, wodurch man das Verhältnis ξ/a (a ist die Gitterkonstante) verkleinert, d.h. das System von T_c wegschiebt, und dann Störungsrechnung machen kann.



Die theoretischen Aussagen der R.G. sind bis heute in einer Vielzahl von Experimenten bestätigt worden, und die Skalenhypothese hat sich als sehr erfolgreich erwiesen [Ref.10, Teil I].

Man unterteilt die Kritischen Phänomene in statische und dynamische. Die statischen Kritischen Phänomene umfassen die Eigenschaften der Systeme im thermischen Gleichgewicht, wie

Magnetisierung, Suszeptibilität usw., während die kritische Dynamik die zeitabhängigen (frequenzabhängigen) Phänomene, wie Relaxationszeiten, Wärmediffusion etc. untersucht. Die typische räumliche Skala, die Korrelationslänge ξ bestimmt in der Dynamik eine typische Zeitskala, $\tau \sim \xi^z$, wobei $z \approx 2$ der sogenannte dynamische kritische Exponent ist. Es zeigt sich nämlich, daß im kritischen Temperaturbereich die Fluktuationen großer Wellenlängen (d.h. Spinblöcke der Größenordnung ξ) über sehr lange Zeiten korreliert bleiben. Dies ist das sogenannte "critical slowing down", die kritische Verlangsamung der Zeitabhängigkeit des Ordnungsparameters am kritischen Punkt.

In der kritischen Statik, wie in der kritischen Dynamik, können die Abhängigkeiten der physikalischen Größen von externen Parametern, wie z.B. Temperatur und Magnetfeld, in Form von Potenzgesetzen beschrieben werden, z.B. die magnetische Suszeptibilität $\chi \sim \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^{-\gamma}$. Die dabei auftretenden kritischen Exponenten sind unabhängig von der Stärke der mikroskopischen Wechselwirkung. Dies bedeutet, daß verschiedene Substanzen identische kritische Exponenten haben, und man bezeichnet diese Eigenschaft als Universalität. Die kritischen Phänomene lassen sich in bestimmte Universalitätsklassen einordnen. Die kritischen Exponenten hängen nur von der Dimension d des Systems und von der Anzahl n der Komponenten des Ordnungsparameters ab, sowie von der Symmetrie des Systems. Symmetrie bedeutet hier die interne Spinsymmetrie. Das bedeutet, je nach dem wie die relevante 4 Spinwechselwirkung des n -komponentigen Ordnungsparameters in den Hamiltonian eingeht, in der Form $(\vec{\sigma}^2)^2$ oder $\sum_{\alpha=1}^n (\sigma^\alpha)^4$, findet man ein anderes kritisches Verhalten.

Das Ising Modell hat zum Beispiel die diskrete Symmetrie von 2 Elementen, d.h. man kann das Vorzeichen aller Spins umdrehen. Das XY Modell beschreibt Systeme, bei denen die Spins in einer Ebene liegen, d.h. $n = 2$. Hier besteht die Spinsymmetrie in Drehungen in der zweidimensionalen Spinebene. Der isotrope Heisenberg Ferromagnet hat einen 3 komponentigen Spin ($n = 3$) und ist invariant unter der Gruppe $O(3)$.

Eine Besonderheit der kritischen Exponenten ist, daß sie sich (bei skalaren oder Vektorordnungsparametern) für Raumdimension $d > 4$ nicht mehr in ihrer Größe ändern. Dies ist ein Ausdruck dafür, daß für $d > 4$ die mittlere Feldtheorie (z.B. Weiß'sche Theorie des Ferromagnetismus) exakt wird. Eine Abschätzung für den Temperaturbereich, in welchem die mittlere Feldtheorie versagt, wurde zuerst von Ginzburg gegeben: $\left(\frac{T - T_c}{T_c}\right)^{\frac{d-2}{2}} < \text{konst.}$ Diese Forderung ist für $d < 4$ niemals für $T \rightarrow T_c$ erfüllt und man muß in diesem Temperaturbereich das R.G. Verfahren verwenden. Interessanterweise werden die R.G. Gleichungen für $d = 4$ exakt. Dies bedeutet, daß der Fall $d = 4$ eine besondere Rolle spielen muß, da hier nicht die (im Rahmen der R.G. Theorie übliche) Entwicklung nach $\epsilon = 4 - d$ notwendig wird. Der Fall $d = 4$ ist zuerst von Larkin und Khmel'nitskii diskutiert worden und es stellt sich heraus (Teil I), daß dipolare uniaxiale Ferromagnete gerade ein solches Verhalten zeigen. Solche Systeme sind in der Natur in Form von LiTbF_4 , GdCl_3 und LiTb_3 realisiert und in den letzten Jahren auch im Rahmen des SFB Frankfurt/Darmstadt von Herrn Kötzler intensiv experimentell untersucht worden.

In Teil I dieser Arbeit wird der Übergang vom uniaxial-dipolar kritischen zum mean-field kritischen Verhalten in LiTbF_4 untersucht. Dabei wird der effektive kritische Exponent
$$\gamma_{\text{Eff}} = \frac{d \ln \chi^{-1}}{d \ln t} \quad (\chi \text{ ist die magnetische Suszeptibilität und } t = (T - T_c) / T_c)$$
 berechnet für ein uniaxial dipolares Ising-system mittels analytischer und numerischer Integration der R.G. Gleichungen. Es wird gezeigt, daß zwischen $\gamma_{\text{Eff}} = 1 + \frac{\text{const}}{|\ln t|} \rightarrow 1$ für $t \rightarrow 0$ nahe bei T_c und dem mean field Wert $\gamma_{\text{Eff}} = 1$ für hohe Temperaturen der Exponent γ_{Eff} durch ein Maximum geht in Übereinstimmung mit Experimenten von Herrn Kötzler an LiTbF_4 , wo dieser Effekt zum ersten Mal gemessen wurde.

Eine Verbesserung der R.G. Gleichungen mittels der Borel Transformation wird ebenfalls diskutiert.

In Teil II wird das Absinken des kritischen Exponenten der Suszeptibilität für geringe Verunreinigungskonzentrationen in uniaxialen Ferromagneten berechnet. Die Nullfeldsuszeptibilitätsdaten für GdCl_3 und LiTbF_4 verunreinigt mit Nd^{3+} , La^{3+} , Y^{3+} zeigen eine deutliche Verringerung des effektiven kritischen Exponenten bei kleinen Konzentrationen ($\lesssim 7\%$). Dieser ebenfalls von Herrn Kötzler gemessene neue Effekt wird erstmals quantitativ mittels R.G. Rechnungen erklärt, unter Verwendung der Verschiebung der gemessenen Curietemperatur.

In Teil III werden dynamische kritische Phänomene untersucht. Eine Bewegungsgleichung für den Ordnungsparameter eines uniaxialen dipolaren Ferromagneten in der Umgebung des kritischen Punktes wird diskutiert mittels der R.G. Theorie. Wir finden eine lineare und eine nichtlineare Relaxationszeit, ein Potenzgesetz für die Magnetisierung bei T_c , sowie die dyna-

mische lineare und nichtlineare Antwortfunktion in einem äußeren statischen Magnetfeld. Zusätzlich wird zum ersten Mal der Einfluß eines statischen äußeren Magnetfeldes auf den kinetischen Koeffizienten in qualitativer Übereinstimmung mit dem Experiment berechnet.

In Teil IV wird die nichtlineare Relaxation des Ginzburg-Landau Modells bei Ankopplung an eine erhaltene Dichte untersucht. Wir zeigen, daß das zeitabhängige Ginzburg-Landau Modell für einen einkomponentigen Ordnungsparameter gekoppelt an eine nichtordnende erhaltene Dichte (Modell C von Halperin und Hohenberg) das dynamische, kritische Verhalten einer bestimmten Klasse von ordnenden Legierungen beschreibt. Eine Bewegungsgleichung für den Ordnungsparameter in Skalenform wird hergeleitet und verwendet um nichtlineare Relaxationsprozesse zu diskutieren, welche in der Umgebung des kritischen Punktes auftreten nach abrupten Temperaturänderungen bzw. abrupten Änderungen des äußeren (symmetriebrechenden) Feldes. Die entsprechenden universellen Amplitudenverhältnisse werden bis zur 1-Loop Ordnung berechnet.

Anders als der dynamische, kritische Exponent zeigen diese Amplitudenverhältnisse große Korrekturen wegen der Fluktuationen und wegen der Kopplung an die erhaltene Dichte in $4 - \epsilon$ räumlichen Dimensionen. Wir verifizieren außerdem die Fisher Renormierung für dieses Modell in beliebiger Ordnung.

TEIL I

DER ÜBERGANG

VOM

UNIAXIAL - DIPOLAREN

KRITISCHEN VERHALTEN

ZUM

MEAN - FIELD VERHALTEN

IN Li Tb F_4

1. Uniaxiale, dipolare Ferromagnete wie LiTbF_4 , GdCl_3 mit sowohl kurzreichweitiger Austausch-, als auch langreichweitiger Dipolwechselwirkung sind von besonderem Interesse um die Aussagen der Renormierungsgruppe (R.G.) zu testen. Dies hat zwei Gründe

a) diese Systeme zeigen ein vierdimensionales Verhalten, wodurch die ϵ -Entwicklung vermieden wird [1,2], und b) die kritischen Singularitäten und Amplitudenverhältnisse sind mit großer Genauigkeit gemessen worden in Obereinstimmung mit R.G. Rechnungen [3-6]. Erst kürzlich wurde die Zustandsgleichung für LiTbF_4 von Herrn Kötzler und Mitarbeitern [7] gemessen, und die berechneten logarithmischen Korrekturen an die mittlere Feldtheorie wurden definitiv gefunden. Das kritische Verhalten von LiTbF_4 gehört nun zu den am besten verstandenen kritischen Phänomenen. Deshalb ist es eine interessante Frage, wie sich das vierdimensionale kritische Verhalten zum kritischen Verhalten der mean-field Theorie fortsetzt als Funktion der reduzierten Temperatur $t = \frac{T - T_c}{T_c}$.

In dieser Arbeit berechnen wir eine Größe, welche für diesen Übergang genügend empfindlich ist, den effektiven Suszeptibilitätsexponenten γ_{Eff} , definiert durch

$$\gamma_{\text{Eff}} = \frac{d(\ln \chi^{-1}(t))}{d \ln t} \quad (1)$$

im Bereich $1 \cdot 10^{-3} \leq t \leq 40$ und vergleichen mit dem Experiment (von Herrn Kötzler) an LiTbF_4 .

Da bereits gezeigt worden ist [8], daß abgesehen von geringfügigen numerischen Unterschieden das dreidimensionale dipolare Isingsystem das gleiche kritische Verhalten zeigt wie das kurzreichweitige vierdimensionale Isingsystem, beschreiben wir unser

System mit dem Ginzburg-Landau-Wilson Hamiltonian [8]

$$H = \frac{1}{2} \int d^4 x \left[r_0 \sigma^2(x) + (\nabla \sigma(x))^2 + \frac{u}{4} \sigma^4(x) \right] \quad (2)$$

wobei $\sigma(x)$ eine einkomponentige Spindichte ist und $r_0 \propto (T - T_C^0)$, mit der Temperatur T bzw. der mean-field Übergangstemperatur T_C^0 . Unter einer Änderung der Längenskala unseres Systems um einen Faktor s werden die Kopplungen in H renormiert nach den R.G. Gleichungen [8] (bis zur zweiten Ordnung in der Vierspinnkopplung u):

$$\frac{du}{dx} = -\frac{9}{2} u^2 + O(u^3), \quad u(0) = u_0 \quad (3a)$$

$$\frac{d \ln t}{dx} = -\frac{3}{2} u + O(u^2), \quad t(0) = t_0 \quad (3b)$$

mit $x = \ln s$.

Man erhält eine Beziehung zwischen der Temperatur und s mit $t[s, t(0)] = s^{-2}$ [8,9]. Aus (3a), (3b) folgt

$$t(x) = t(0) \cdot \left(1 + \frac{x}{x_0} \right)^{-1/3} \quad (4)$$

wobei $x_0 = \frac{2}{9 u_0}$. Daraus erhält man die bekannte Beziehung für die Suszeptibilität

$$\chi(t_0) \propto t_0^{-1} \cdot |\ln t_0|^{+1/3}, \quad (5)$$

welche im Bereich $t_0 \ll 1$ gültig ist. Zwei Gründe erlauben nun eine Fortsetzung von (5) aus dem asymptotischen kritischen Bereich $t_0 \approx 0$ zu höheren Temperaturen $t_0 \approx 1$.

Erstens gilt bei der Herleitung des Ginzburg-Landau Hamiltonian $t_0 = \frac{T - T_c}{T_c}$ nur für $\frac{T - T_c}{T_c} \ll 1$. Deshalb gilt $t_0 = \frac{T - T_c}{T}$ [10], so daß wir im logarithmischen Term in (5) substituieren $t_0 = \frac{T - T_c}{T} = \frac{t}{1+t} \leq 1$ für alle T . Der zweite Grund ist, daß nach dem Fluktuations- Dissipationstheorem

$$\chi \sim \frac{1}{T} \int d^3 \vec{r} \langle \sigma_{\vec{r}} \sigma_0 \rangle$$

ist, wobei $\langle \sigma_{\vec{r}} \sigma_0 \rangle$ die Spin-Spin Korrelationsfunktion ist, welche wie s^2 skaliert und für welche (5) gilt. Dies bedeutet, wenn wir die richtige Ersetzung $t_0^{-1} = \left(\frac{T - T_c}{T} \right)^{-1}$ machen, kürzen sich die T und wir erhalten das Resultat:

$$\chi(t) \sim t^{-1} \cdot \left(1 - \frac{\ln \frac{t}{1+t}}{t_{00}} \right)^{1/3} \quad (6)$$

mit $t_{00} = 2 \cdot \chi_0$. Daraus folgt mit (1)

$$\gamma_{\text{Eff}} = 1 + \frac{1}{3 \cdot t_{00}} \cdot \frac{1}{1+t} \cdot \frac{1}{1 + \frac{|\ln \frac{t}{1+t}|}{t_{00}}} \quad (7)$$

(7) ist dargestellt in Fig. 1, mit $u_0 = 0.5$ als Fitparameter. In Übereinstimmung mit den Daten finden wir ein Maximum bei $\ln t \approx -0.6$ und asymptotisch gilt $\gamma_{\text{Eff}} = 1 + \frac{\text{const}}{|\ln t|} \rightarrow 1$. Im nächsten Abschnitt 2 werden mögliche Verbesserungen an dieser sehr einfachen Theorie diskutiert.

2. Verbesserung der Resultate im kritischen Bereich ($\ln t < 0$)

In diesem Abschnitt sollen die möglichen Verbesserungen der in Abschnitt 1 dargestellten Resultate bis $O(u^2)$ (3a,3b) diskutiert werden. Wir verwendeten die $O(u^3)$ Terme und integrierten die R.G. Gleichungen für $d = 4$ (3a), (3b) numerisch [8], (Teil II) und erhielten $\gamma_{\text{Eff}}(t)$ aus der Beziehung:

$$\gamma_{\text{Eff}}(t) = 1 + \frac{1}{2} u(t) - \frac{1}{4} u^2(t) \quad (8)$$

Die Resultate sind in Fig.2 dargestellt und können direkt verglichen werden mit dem $\gamma_{\text{Eff}}(t)$, welches aus der Rechnung Brézins [11] für $\chi(t)$ folgt:

$$\chi^{-1}(t) \sim t |\ln t|^{-1/3} \cdot \left[1 + c \cdot \frac{\ln |\ln t|}{|\ln t|} \right] \quad (9)$$

mit $c = \frac{1}{243} (108 \ln(\frac{4}{3}) + 41)$. Diese Rechnung wurde für ein $d = 3$ uniaxiales dipolares System durchgeführt, die numerischen Unterschiede zwischen diesem Resultat und dem für $d = 4$ liegen jedoch nur in der Größenordnung 1%.

Die $\ln |\ln t|/|\ln t|$ Korrekturterme ändern etwas die Resultate, welche man bis $O(u^2)$ erhält (Fig.1). Da (9) für $|\ln t|$ klein keinen crossover beschreibt, verwendeten wir eine phänomenologische Formel analog zu (5)

$$\chi^{-1}(t) \sim t \cdot \left[1 + \frac{|\ln \frac{t}{1+t}|}{t_{00}} + c \cdot \ln \left(1 + \frac{|\ln \frac{t}{1+t}|}{t_{00}} \right) \right]^{-1/3} \quad (10)$$

Aus (10) erhalten wir mit (1) eine Beziehung für $\gamma_{\text{Eff}}(t)$:

$$\gamma_{\text{Eff}} = 1 + \frac{1}{3 \cdot t_{00}} \cdot \frac{1}{1+t} \cdot \left(1 + \frac{c}{1 + \frac{|\ln \frac{t}{1+t}|}{t_{00}}} \right) \quad (11)$$

$$\cdot \frac{1}{\left[1 + \frac{|\ln \frac{t}{1+t}|}{t_{00}} + c \cdot \ln \left(1 + \frac{|\ln \frac{t}{1+t}|}{t_{00}} \right) \right]}$$

Die entsprechenden Resultate sind in Fig.3 (mit $u_0 = 0.5$) dargestellt und zeigen nur kleine Abweichungen (eine geringe Verbesserung) im kritischen Bereich.

Wie zuerst von Brêzin [11,12] diskutiert wurde, führen die $O(u^4)$ Terme in (3a) zu einem Zusatzterm in $\chi(t)$ von der Form $\frac{\tilde{c}}{|\ln t|}$, welcher nur etwas weniger relevant als der $\frac{\ln |\ln t|}{|\ln t|}$ Term ist, und in dem die Konstante $\tilde{c}$ unbestimmt ist. $\tilde{c}$ hängt von einem beliebigen nichtuniversellen Parameter ab, welcher in den Renormierungsgruppenbedingungen enthalten ist, und der nicht für die $d = 4 - \epsilon$ bzw. $d = 3 - \epsilon$ Entwicklungen mit $\epsilon \rightarrow 0$ verschwindet. Um eine mögliche Verbesserung bis $O(u^3)$ in den R.G. Gleichungen zu erzielen, verwendeten wir deshalb die Technik der Boreltransformation [13]. Dann gilt für $\gamma_{\text{Eff}}(u)$ bis $O(u^2)$, mit $d = 4$:

$$\gamma(u) = 1 + \tilde{B}_1 \cdot \int_0^\infty dt e^{-t} \cdot t^b \cdot \frac{\sqrt{1 + a \cdot u \cdot t} - 1}{\sqrt{1 + a \cdot u \cdot t} + 1} + \tilde{B}_2 \cdot \int_0^\infty dt e^{-t} \cdot t^b \cdot \left(\frac{\sqrt{1 + a \cdot u \cdot t} - 1}{\sqrt{1 + a \cdot u \cdot t} + 1} \right)^2 \quad (12)$$

$$\text{mit } \tilde{B}_1 = \frac{4}{a} \cdot B_1, \quad \tilde{B}_2 = \frac{4}{a} \left(2 \cdot B_1 + \frac{4}{a} B_2 \right), \quad B_1 = \frac{1/4}{(5!)}, \quad B_2 = \frac{-1/16}{(6!)}.$$

Wir verwendeten für den Parameter $b = 4$ [13], $u_0 = 0.5$ und integrierten die Borel transformierten R.G. Gleichungen (3a), (3b) (mit den $O(u^3)$ Termen) numerisch. Für a verwendeten wir $a = 34/315$, ein Wert, welcher etwas kleiner als der Wert a für $d = 3$ [13] ist. Unser a berechneten wir aus der Bedingung, daß die Wilsonfunktion $\beta(u)$, d.h. der Term auf der rechten Seite von (3a) asymptotisch (für große u) verschwindet. Dies ist eine sinnvolle Forderung, da die numerische Analyse einen zusätzlichen unphysikalischen Fixpunkt (neben dem Gaußschen Fixpunkt) für die R.G. Gleichungen bis $O(u^3)$ zeigt. (Für den Wert von a , welcher für $d = 4$ berechnet wurde, $a(d=4) = \frac{1}{16\pi^2}$ und $u(0) < 1$ unterscheidet sich die Boreltransformierte numerisch nicht von der gewöhnlichen Funktion $\beta(u)$.)

Die Resultate für $\gamma_{\text{Eff}}(t)$ sind in Fig.4 dargestellt. Die Übereinstimmung mit den Daten läßt sich noch etwas verbessern gegenüber Fig. 1-3. Ein weiteres Variieren von a zwischen $a(d=4) \leq a \leq a(d=3)$ führt zu keinen weiteren relevanten Änderungen der Resultate.

Literaturhinweise zu Teil I

- 1 Larkin, A.I., Khmel'nitskii, D.E., Zh. Eksp. Theor. Fiz. 56, 2087 (1969); Sov. Phys. JETP 29, 1123 (1969)
- 2 Aharony, A., Phys. Rev. B8, 3363 (1973)
Folk, R., Iro, H., Schwabl, F., Z. Physik B27, 169 (1977)
- 3 Kötzler, J., Scheithe, W., Solid State Commun. 12, 643 (1973)
Kamleiter, G., Kötzler, J., Solid State Commun. 14, 787 (1974)
Kötzler, J., Kamleiter, G., Weber, G., J. Phys. C9, L 361 (1976)
- 4 Ahlers, G., Kornblik, A., Guggenheim, H.J., Phys. Rev. Lett. 34, 1227 (1975)
Frowein, R., Kötzler, J., Z. Physik B25, 279 (1976)
- 5 Brinkmann, J., Courths, R., Guggenheim, H.J., Phys. Rev. Lett. 40, 1286 (1978)
- 6 Beauvillain, P., Chappert, C., Laursen, I., J. Phys. C13, 1481 (1980)
- 7 Frowein, R., Kötzler, J., Assmus, W., Phys. Rev. Lett. 42, 739 (1979)
- 8 Liebmann, R., Schaub, B., Schuster, H.G., Z. Physik B37, 69 (1980)
- 9 Schuster, H.G., Z. Physik B27, 251 (1977)
- 10 Wilson, K.G., Kogut, J., Phys. Rep. 12C, 75 (1974)
- 11 Brézin, E., Zinn-Justin, J., Phys. Rev. B13, 251 (1976)
- 12 Brézin, E., Le Guillou, J.C., Zinn-Justin, J.: Field Theoretical Approach to Critical Phenomena, ed. by Domb and Green, Academic Press (1976)
- 13 Brézin, E., Le Guillou, J.C., Zinn-Justin, J., Phys. Rev. D15, 1544 (1977)
Le Guillou, J.C., Zinn-Justin, J., Phys. Rev. Lett. 39, 95 (1977)
Brézin, E., Parisi, G., Journal of Statistical Physics 19, 269 (1978)
Le Guillou, J.C., Zinn-Justin, J., to be published in Phys. Rev. B (1980)

Erläuterungen zu den Abbildungen

Fig. 1 $\gamma_{EFF} = 1 + \frac{1}{3 \cdot t_{00}} \cdot \frac{1}{1+t} \cdot \frac{1}{1 + \frac{1}{t_{00}} \cdot \left| \ln \frac{t}{1+t} \right|}$ ist aufgetragen gegen $\ln t$ für $t_{00} = 1 (u_0 = 0.5)$ im Bereich $1 \cdot 10^{-3} \leq t \leq 40$ und wird mit den experimentellen Werten verglichen.

Fig. 2 γ_{EFF} aufgetragen gegen $\ln t$ für $\ln t < 0$. γ_{EFF} wurde berechnet aus numerischer Integration der R.G. Gleichungen bis $O(u^3)$ mit $u(0) = 0.5$.

Fig. 3 γ_{EFF} nach (9) aufgetragen gegen $\ln t$ (die $\frac{\ln |\ln t|}{|\ln t|}$ Terme sind berücksichtigt), $t_{00} = 1$.

Fig. 4 γ_{EFF} berechnet nach (10) unter Verwendung der Borel-transformierten R.G. Gleichungen (3a), (3b) bis $O(u^3)$. $u_0 = 0.5$ und $a = 34/315$ wurden verwendet.

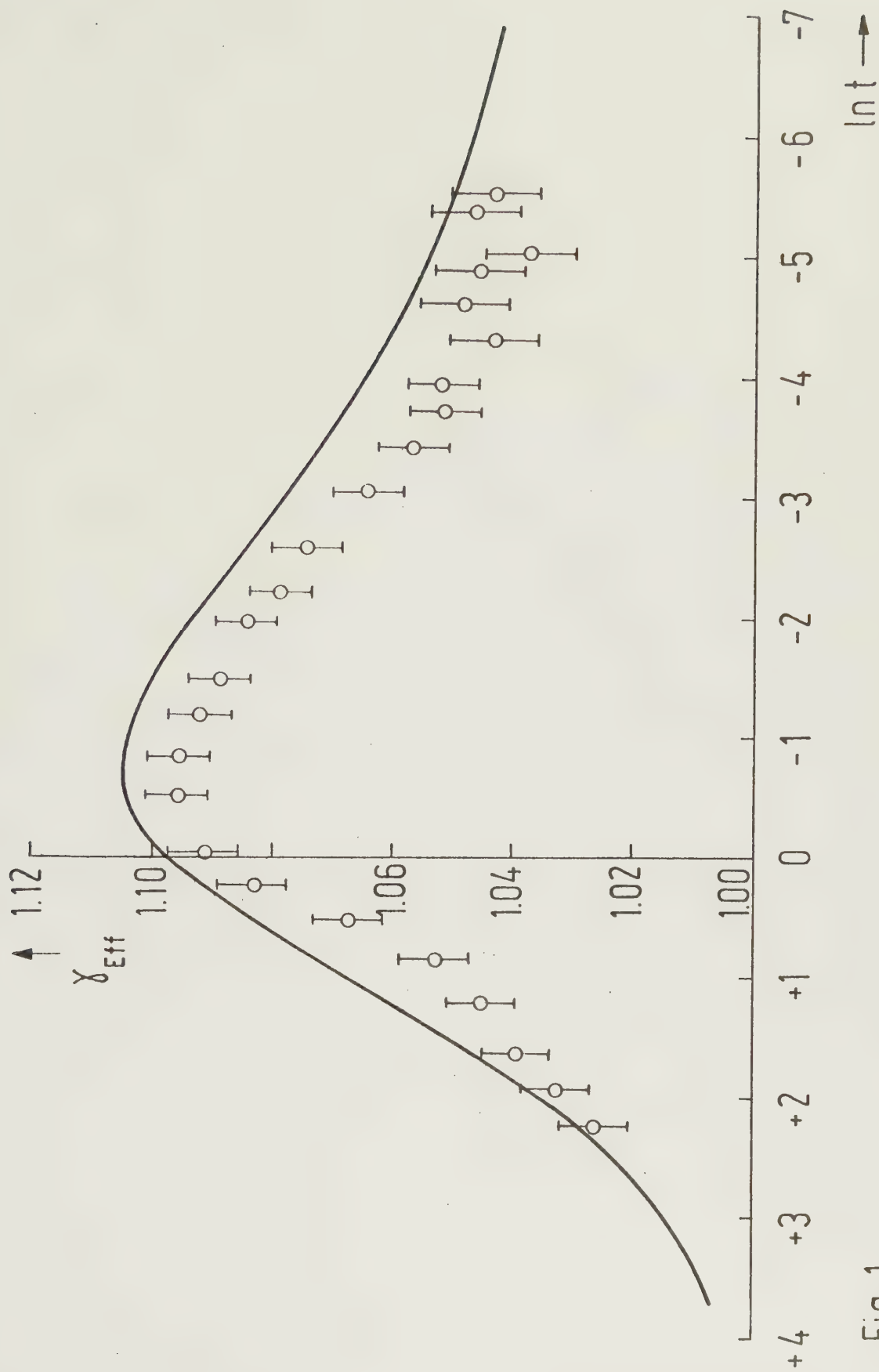


Fig.1

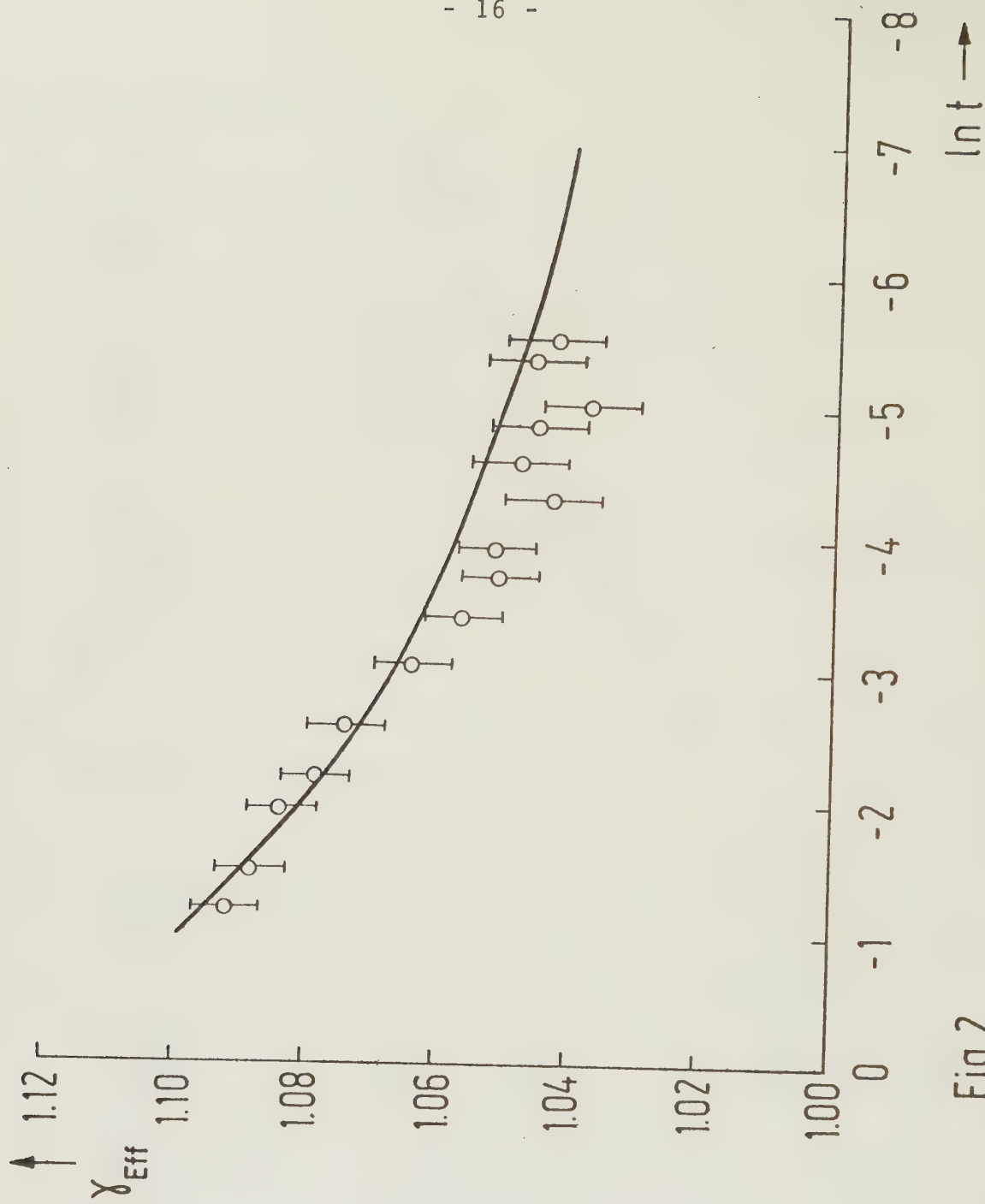


Fig.2

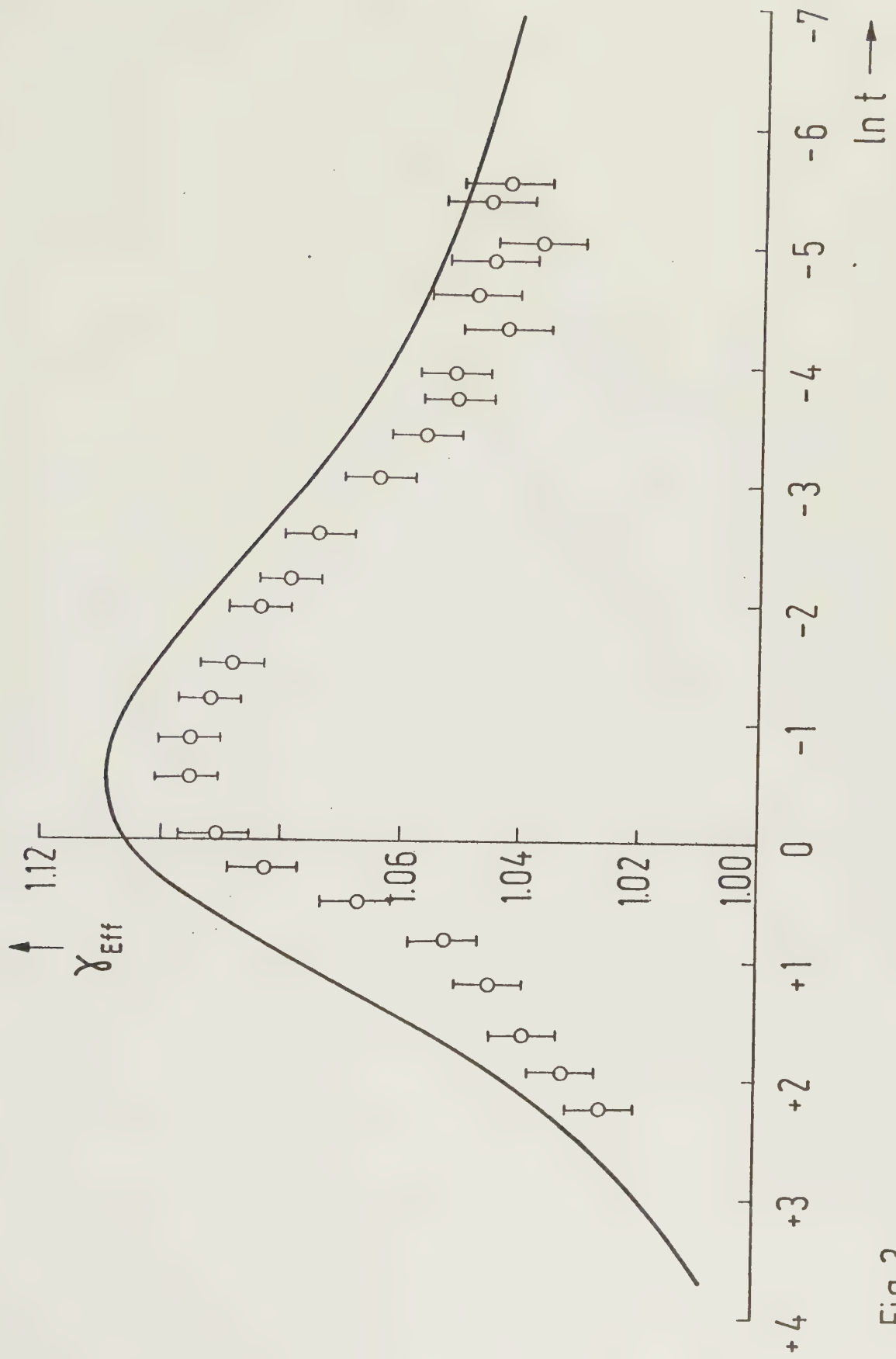


Fig.3

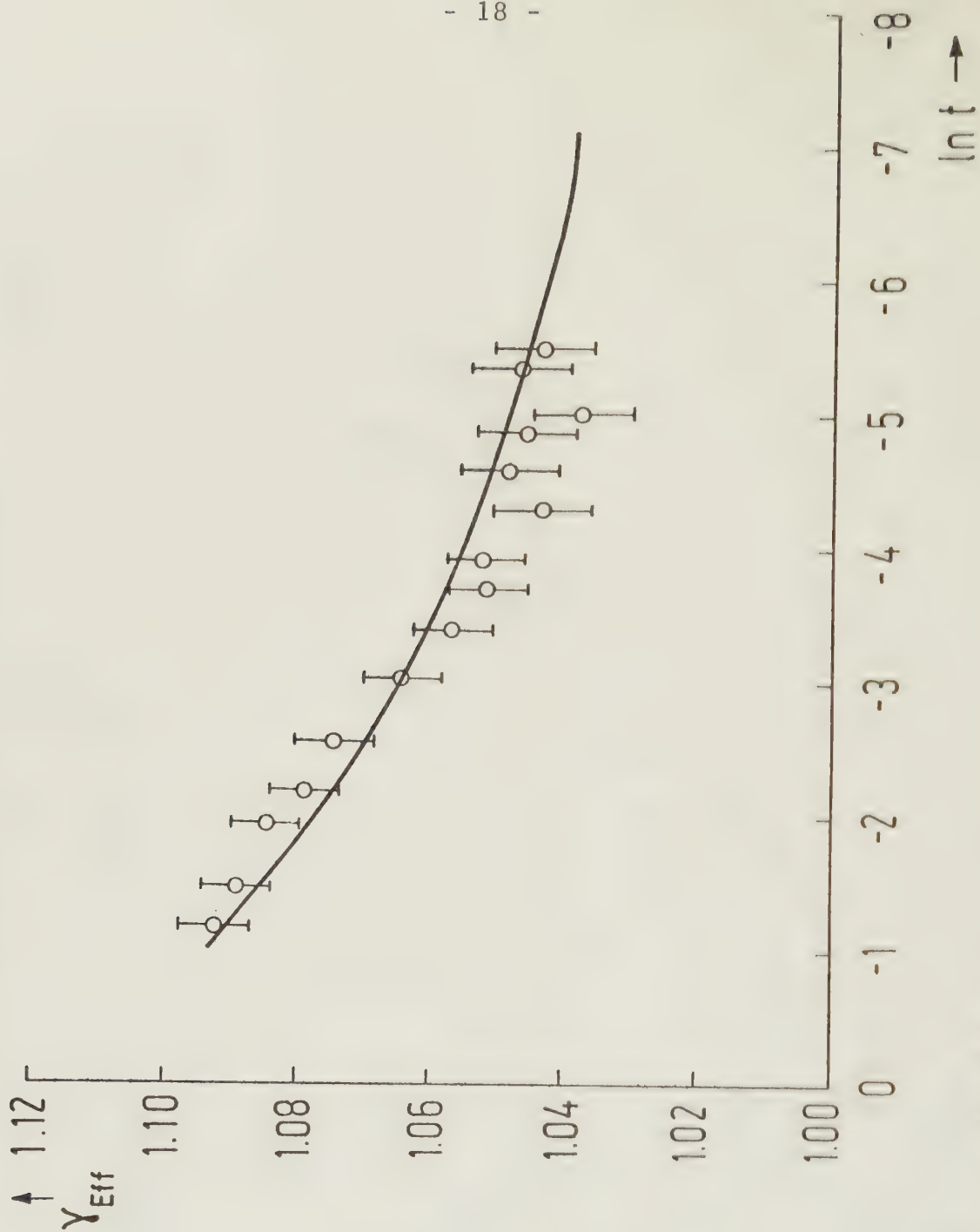


Fig. 4

TEIL II

DAS CROSSOVER VERHALTEN
IN
SCHWACH VERUNREINIGTEN
UNIAXIALEN FERROMAGNETEN
MIT
DIPOLWECHSELWIRKUNG

1. Einleitung und Zusammenfassung

Während das asymptotische Verhalten reiner und "random" uniaxialer Ferromagnete mit Dipolwechselwirkung nahe bei T_c intensiv untersucht worden ist [1,2,3], wurde die besonders experimentell interessierende Frage, wie, das als Funktion der Temperatur verunreinigte System vom "reinen kritischen Verhalten [1]" weit weg von T_c zum "verunreinigten kritischen Verhalten [2,3]" nahe bei T_c übergeht, bisher nicht untersucht. Um eine Grundlage für das Verständnis kürzlicher Experimente an $Gd_{1-x}Nd_xCl_3$ und $LiTb_{1-x}Y_xF_4$ [4], welche Beispiele für die erwähnten Systeme sind, zu bekommen, haben wir die Renormierungsgruppengleichungen [2,3] die das kritische Verhalten beschreiben, gelöst für weite Bereiche der Temperatur und des Verunreinigungsgrades.

Bevor wir in die Details der Rechnungen gehen, soll hier zunächst eine kurze Zusammenfassung der wichtigsten Resultate gegeben werden.

1. Für eine vorgegebene feste Konzentration x der Verunreinigung ist es praktisch unmöglich einen Übergang vom "reinen" zum "verunreinigten" kritischen Bereich als Funktion der Temperatur zu beobachten. Der Übergangs (crossover) Bereich ist extrem breit (viele Zehnerpotenzen auf der Temperaturskala, Fig.2). Qualitativ kann man dieses Ergebnis zurückführen auf die schwache Kopplung der Verunreinigungen an das System.

Diese Kopplung wird nämlich beschrieben durch die spezifische Wärme C , welche bei uniaxialen Systemen einen verschwinden-

den kritischen Exponenten besitzt: $\alpha = \frac{d \ln C}{d \ln t} \rightarrow 0$, wobei $t = \frac{T - T_c}{T_c}$ [2,5].

2. Das asymptotisch universelle (x unabhängige) "random" kritische Verhalten [2,3] kann nur in einem kleinen Parameterbereich (Gleichung 9) beobachtet werden, was spezifischen Konzentrationen entspricht (Gleichung 11). Für alle anderen Konzentrationen (allerdings immer $x \ll 1$) wird das kritische Verhalten nichtuniversell für experimentell mögliche Temperaturdifferenzen $T - T_c$, und hängt von x ab. Ein Beispiel dafür zeigt Fig.3, wo der meßbare effektive Exponent

$$\bar{\gamma} = \frac{\ln \chi^{-1}(t_1) - \ln \chi^{-1}(t_2)}{\ln t_1 - \ln t_2}$$

der magnetischen Suszeptibilität für verschiedene Parameterwerte (bezogen auf verschiedene Konzentrationen x) geplottet ist. Die aus der numerischen Lösung gefundene Möglichkeit, daß $\bar{\gamma}$ mit größerer Konzentration der Verunreinigungen abnimmt, stimmt zwar nicht überein mit Reihenentwicklungen für das 3 dimensionale (site-diluted) Isingmodell [6,7], aber mit Experimenten, die kürzlich von Kötzler et al.[4] durchgeführt wurden. Die Nullfeldsuszeptibilitätsdaten für GdCl_3 und LiTbF_4 verunreinigt mit (Nd^{3+} , La^{3+} , Y^{3+}) zeigen nämlich eine deutliche Verringerung des effektiven kritischen Exponenten γ_{Eff} bei kleinen Verunreinigungskonzentrationen ($\lesssim 7\%$). Erst für größere Verunreinigungskonzentrationen wird γ_{Eff} wie erwartet größer.

3. Zusätzlich finden wir aus der numerischen Lösung, daß die temperaturabhängige 4 Spin-Kopplungskonstante $u \propto f_2$ (meßbar über die Zustandsgleichung $H = \chi^{-1} M + f_2 M^3$, wobei H das magnetische Feld ist und M die Magnetisierung) ebenfalls ein nichtuniverselles kritisches Verhalten zeigen sollte. In der (meßbaren) Umgebung von T_c sollte $\frac{1}{u(t)}$ proportional sein zu $|\ln t|$, mit einem x abhängigen Vorfaktor.

2. Das verwendete Modell und die Renormierungsgruppengleichungen

In diesem Abschnitt werden das verwendete Modell und die Renormierungsgruppengleichungen (R.G.), die daraus folgen in Kurzform angegeben [2,3].

Wie bereits in Teil I erwähnt, zeigen uniaxiale dipolare Systeme ein effektiv vierdimensionales Verhalten [2] und deshalb kann man mit folgendem Ginzburg-Landau Hamiltonian arbeiten [3]:

$$H = \frac{1}{2} \int d^4x \left[r_0 \sigma^2(x) + (\nabla \sigma(x))^2 + \varphi(x) \sigma^2(x) + \frac{u}{4} \sigma^4(x) \right] \quad (1)$$

Dabei ist $\sigma(x)$ eine einkomponentige Spindichte, $r_0 \propto (T - T_c^0)$, wobei T und T_c^0 die Temperatur bzw. die mean-field Obergangstemperatur sind und u ist die 4 Spin-Kopplungskonstante.

Die nichtmagnetischen Verunreinigungen werden über ein statisches Gaußfeld $\varphi(x)$ eingeführt [2,3]:

$$\overline{\varphi(x)} = 0, \quad \overline{\varphi(x) \varphi(x')} = \Delta \cdot S(x - x') \quad (2)$$

wobei der Querstrich die Mittelung über die φ Verteilung angibt, und Δ ein Maß für die Verunreinigungskonzentration (randomness) des Systems ist.

Unter einer Änderung der Längenskala unseres Systems um einen Faktor s renormieren sich die Kopplungen in H entsprechend den R.G. Gleichungen [3]:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -3u(u - 2\Delta) + u(34u^2 - 138u\Delta + 123\Delta^2) / 6 ; \quad (3a)$$
$$u(0) = u_0$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial x} = -2\Delta(u - 2\Delta) + \Delta(63\Delta^2 - 66u\Delta + 10u^2) / 6 ; \quad (3b)$$
$$\Delta(0) = \Delta_0$$

$$\frac{\partial \ln t}{\partial x} = - \left[u - \Delta + \frac{5}{6} (u - \Delta)^2 \right] ; \quad t(0) = t_0 \quad (3c)$$

mit $x = \ln s$. Eine Beziehung zwischen der Temperatur $t(0)$ und s erhält man aus der Forderung $t[s, t(0)] \cdot s^2 = \text{const}$ [3] (damit für $s \rightarrow \infty$, $t \rightarrow 0$ gilt).

Abschließend ist noch zu bemerken, daß die Unterschiede zwischen den Gleichungen (3a - 3c) für Systeme mit $d = 4$ und den entsprechenden Gleichungen für $d = 3$, uniaxial dipolar, sowohl im reinen Fall (Brêzin et al.[8]) als auch im verunreinigten Fall (Aharony [2]) praktisch unwesentlich sind. Die numerischen Unterschiede sind von der Größenordnung 1%.

3. Die numerische Lösung der R.G. Gleichungen

a) Crossover

Die Lösungen der R.G. Gleichungen (3) werden durch numerische Integration gefunden und hängen nur von den Anfangswerten der beiden Kopplungskonstanten $u(t = t_0) = u_0$ und $\Delta(t = t_0) = \Delta_0$ ab, wobei wir immer ohne Beschränkung der Allgemeinheit $t_0 = 1$ gesetzt haben. Fig.1 zeigt die Flußlinien der R.G. in der u - Δ Ebene. Bei $u = \Delta = 0$ ist der Gaußsche Fixpunkt. Alle Flußlinien, welche im nicht schraffierten Bereich der Ebene beginnen, mit $\Delta_0 > 0$ erreichen diesen Fixpunkt asymptotisch entlang der punktierten Linie $u = 2\Delta$. Einen zweiten Fixpunkt findet man bei $u = \frac{9}{17}$, $\Delta = 0$. Dieser Fixpunkt ist jedoch physikalisch bedeutungslos, da die R.G. Gleichungen (3a,b) nur Terme bis zur dritten Ordnung in u , Δ enthalten und deshalb nur für $u, \Delta \ll 1$ physikalisch relevant sind.

Das Verhalten der Flußlinien ändert sich in der Umgebung von $u = 2\Delta$. Für $|u - 2\Delta| \gg u^2, \Delta^2$ können die Terme dritter Ordnung vernachlässigt werden, und die Flußlinien werden beschrieben durch

$$\begin{pmatrix} \frac{\Delta}{\Delta_0} \end{pmatrix}^3 = \begin{pmatrix} \frac{u}{u_0} \end{pmatrix}^2 . \quad (4)$$

Für $\Delta_0 \ll u_0$ erhalten wir daraus das asymptotische "reine" Verhalten, zuerst gefunden von Larkin und Khmel'nitskii [1], mit

$$\frac{1}{u(t)} \propto \left| \ln \left(\frac{t}{t'} \right) \right| . \quad (5)$$

Für $u - 2\Delta \approx \frac{1}{2} u^2$ findet man das asymptotische "random" Verhalten, berechnet von Aharony [2] und Schuster [3], mit

$$\frac{1}{u(t)} = \sqrt{\frac{53}{24} \ln \left(\frac{t}{t''} \right)}, \quad (6)$$

wobei t' und t'' in (5) und (6) Konstanten sind.

Um das crossover Verhalten zu diskutieren ist es sinnvoll, die Größe $u^* = 8 \Delta_0^3 / u_0^2$ einzuführen, in deren Umgebung die Flußlinien vom Verhalten nach (5) zum Verhalten nach (6) übergehen. Die Breite des crossover $\delta |\ln t|$ hängt nur von u^* ab.

Ein zweckmäßiges Maß zur Bestimmung der Breite $\delta |\ln t|$ ist die Größe $Q = \frac{d^2 \ln t}{d(1/u)^2} = Q$. In der asymptotisch "reinen" Region verschwindet Q nach (5). Im asymptotischen "random" Bereich hat Q den konstanten Wert $48/53$. Deshalb erwartet man im Bereich des reinen kritischen Verhaltens ein Plateau nahe $Q = 0$. Im crossover Bereich ist Q stark temperaturabhängig und bei kleinen reduzierten Temperaturen $t \rightarrow 0$ sollte Q schließlich den Wert $48/53$ erreichen, der den asymptotischen "random" Bereich anzeigt.

In Fig.2 ist Q aufgetragen gegen $-\ln t / \ln 10^{100}$ für drei verschiedene Werte von u^* . In der Tat wird bei sehr kleinen Temperaturen der Wert $48/53$ erreicht, aber entscheidend ist die extreme Breite des crossover Gebietes, die sich über 100 bis 1000 Zehnerpotenzen erstreckt.

Unsere numerischen Resultate können wir durch weitere Analyse der R.G. Gleichungen stützen. Dividieren wir (3b) durch

(3a) dann erhalten wir

$$\frac{d\Delta}{du} = \frac{\Delta}{u} \cdot f(u, \Delta) . \quad (7)$$

Im asymptotisch reinen Bereich gilt $f = f_p = \frac{2}{3}$ während im asymptotischen random Bereich $f = f_r = 1$ gilt. Definiert man den Beginn des crossover durch $f_1 = f_p + (f_r - f_p) \frac{1}{10}$ und das Ende durch $f_2 = f_p + (f_r - f_p) \frac{9}{10}$, so wird die entsprechende Änderung von u , $\delta u/u^2 \approx -30$. Mit (3a) und $\ln t \approx -\frac{1}{2} x$ erhalten wir schließlich

$$\delta |\ln t| \approx \frac{20}{u^*} \quad (8)$$

in ungefährrer Übereinstimmung mit den numerischen Resultaten in Fig. 2.

Da die R.G. Gleichungen nur für $u \lesssim 0.5$ sinnvoll sind, erhalten wir $\delta |\ln t| > 40$ bzw. mehr als 17 Zehnerpotenzen in der reduzierten Temperatur t für alle vernünftigen Werte von u_0, Δ_0 !

Für Experimente heißt das, daß es unmöglich sein sollte den vollständigen crossover vom asymptotisch reinen zum asymptotisch verunreinigten Verhalten zu beobachten. In jedem System mit einer gegebenen Verunreinigungskonzentration sollte man nur einen kleinen Ausschnitt des crossover sehen. Das random kritische Verhalten kann nur in einem schmalen Konzentrationsbereich erwartet werden, gegeben durch

$$\frac{2 \Delta_0}{u_0} \approx 1 . \quad (9)$$

Zum Beispiel zeigt die Kurve mit $u^* = 0.069$ (und $\frac{2 \Delta_0}{u_0} = 0.94$) in Fig. 2, daß man schon für $t = 1$ nicht so sehr weit vom random asymptotischen Verhalten entfernt ist.

b) Die magnetische Suszeptibilität $\chi(t)$

Aus der numerischen Lösung $u = u(x; u_0, \Delta_0)$ und $\Delta = \Delta(x; u_0, \Delta_0)$ kann man direkt die Suszeptibilität $\chi(t)$ bestimmen [3]. Um den Vergleich mit dem Experiment zu erleichtern, haben wir den effektiven kritischen Exponenten

$$\bar{\gamma} = \frac{\ln \chi^{-1}(t_1) - \ln \chi^{-1}(t_2)}{\ln t_1 - \ln t_2} \quad (10)$$

mit t im experimentell möglichen Bereich ($\ln t_1 = -1$, $\ln t_2 = -6$) berechnet. $\bar{\gamma}$ ist nur eine Funktion der Anfangswerte u_0 , Δ_0 .

Nach [2] nehmen wir (für $x \ll 1$)

$$\Delta_0 = c \cdot x \quad (11a)$$

und entwickeln auch u_0 in niedrigster Ordnung nach der Verunreinigungskonzentration x

$$u_0 = u_{00} - \beta \cdot \Delta_0, \quad (11b)$$

wobei $u_{00} = u_0$ für den reinen Fall mit $\Delta_0 = 0$.

Fig.3 zeigt die Abhängigkeit von $\bar{\gamma}$ von $\frac{2 \Delta_0}{u_0}$ für verschiedene Werte von β . Wir haben hier den Wert $u_{00} = 0.2$ genommen, der nahe dem Wert liegt, welcher durch Fits an Suszeptibilitätsmessungen für GdCl_3 [9] bestimmt wurde. Fig.3

zeigt, daß für alle kleinen Verunreinigungskonzentrationen der effektive Exponent $\bar{\gamma}$ linear von x abhängt. Dieses numerische Resultat kann mittels folgender Approximation verstanden werden. Verwendet man in $\gamma(u, \Delta) = 1 + \frac{1}{2} (u - \Delta) + O((u - \Delta)^2)$ die Anfangswerte u_0, Δ_0 anstelle der gemittelten Werte, dann erhält man mit (11)

$$\begin{aligned} \bar{\gamma} &\approx 1 + \frac{1}{2} (u_0 - \Delta_0) = \left(1 + \frac{u_{00}}{2} \right) - \left(\frac{\beta + 1}{2} \cdot c \right) x \\ &= \left(1 + \frac{u_{00}}{2} \right) - \left(\frac{\beta + 1}{4} u_{00} \right) \cdot \frac{2\Delta_0}{u_0} + O\left(\left(\frac{2\Delta_0}{u_0} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Für höhere Konzentrationen ergibt sich ein komplizierteres Verhalten mit c und β als anpaßbaren Parametern.

c) Die 4-Spin-Kopplung

In Fig.4 ist das Inverse der 4 Spinkopplungskonstante $u(t)$ gegen $\ln t$ aufgetragen, für verschiedene Werte von Δ_0 , mit $\beta = 3$ und $u(t)$ auf 1 normiert für $t = 1$. Der Bereich in welchem $\frac{1}{u(t)}$ ungefähr linear in $\ln t$ ist, hängt von β ab.

Die Resultate in Fig.4 können aus folgenden Überlegungen verstanden werden. Für $u \gg 2\Delta$ folgt aus (3a) $u' = -3u(u - 2\Delta)$. Setzt man $\Delta = \Delta_0 (u/u_0)^{2/3}$ aus (4) ein (dies sollte in diesem Bereich gelten), so erhält man

$$u' = -3u \left(u - 2 \frac{\Delta_0}{u_0^{2/3}} \cdot u^{2/3} \right).$$

Multipliziert man den 2. Term in der Klammer, der verglichen mit u^2 eine langsam variiierende Funktion ist, mit $(u/u_0)^{1/3}$, dann erhält man

$$u' \approx - 3 \left(1 - \frac{2\Delta_0}{u_0} \right) u^2$$

und daraus durch Integration

$$\frac{u(t = 1)}{u(t)} \approx 1 + \frac{3}{2} \left(u_0 - 2\Delta_0 \right) |\ln t| . \quad (13)$$

Dieses Resultat ist in guter Übereinstimmung mit den Abbildungen in Fig.4, und zeigt, daß die Krümmungen der Kurven in guter Näherung durch $\frac{3}{2} (u_0 - 2\Delta_0)$ gegeben sind.

Deshalb machen wir die Voraussage, daß der Vorfaktor $f_2 \propto u$ in der Zustandsgleichung $H = \chi^{-1} M + f_2 M^3$ ebenfalls ein nicht-universelles Verhalten zeigt, und daß die Kombination

$$[f_2(t = 1) / f_2(t) - 1] / |\ln t| = \frac{3}{2} (u_0 - 2\Delta_0)$$

nach (11) auch linear von der Verunreinigungskonzentration x abhängt. Dies würde einen unabhängigen Test der Fitparameter c , β von $\bar{Y}$ erlauben.

Diskussion

Da unsere Resultate bereits in der Einleitung zusammengefaßt wurden, sollen hier nur einige Bemerkungen über möglich Messungen gemacht werden. Verunreinigte uniaxiale, dipolare Ferromagnete können erhalten werden (und wurden bereits so hergestellt) durch das Ersetzen magnetischer Ionen in $GdCl_3$ oder $LiTb_4$ durch Ionen mit einem anderen magnetischen Moment ($Gd_{1-x}Nd_xCl_3$) oder nichtmagnetischen Ionen ($Gd_{1-x}La_xCl_3$, $LiTb_{1-x}Y_xF_4$). Für kleine Konzentrationen ($x \ll 1$) erwarten wir nach unseren Berechnungen

ein nichtuniverselles kritisches Verhalten (in meßbarem Abstand von T_C) mit effektiven Exponenten, welche linear von x abhängen. Für höhere Konzentrationen wird ein komplizierteres Verhalten möglich bis schließlich die Annahme unkorrelierter Verunreinigungen zusammenbricht.

Man könnte sich allerdings vorstellen, daß für eine höhere Verunreinigungskonzentration die Dipolwechselwirkung schwächer wird (das Lösen der kurzreichweitigen ferromagnetischen Bindungen bedeutet, daß die Dipole sich leichter antiparallel stellen und somit abschirmen können). Daraus würde ein crossover von effektiv vierdimensionalem zu dreidimensionalem kritischem Isingverhalten, mit möglicherweise größeren $\bar{\gamma}$ Werten, folgen. Zusammenfassend kann man also sagen, daß Messungen an uniaxialen, verunreinigten Ferromagneten in verschiedenen Konzentrationsbereichen von großem Interesse sind.

In der Zwischenzeit wurden in [12] die Nullfeldsuszeptibilitätsdaten für $GdCl_3$ und $LiTbF_4$ verunreinigt (bis zu 12%) mit (Nd^{3+} , La^{3+} , Y^{3+}) verglichen mit unseren numerischen Rechnungen. Unter Verwendung der gemessenen Verschiebung der Curietemperatur $T_C(x)$ und des Zusammenhangs zwischen der Kopplung Δ und der Verunreinigungskonzentration x , kann man $\gamma_{Eff}(x)$ berechnen und mit den gemessenen Werten vergleichen. Die Resultate sind in Fig.5 dargestellt.

Die vorliegende Arbeit wurde zusammen mit Dr. R. Liebmann angefertigt und wurde in [11] veröffentlicht. Wir bedanken uns bei Dr. J. Kötzler sehr herzlich für hilfreiche Diskussionen und für die Übersendung seiner Meßergebnisse vor der Veröffentlichung.

Literaturhinweise zu Teil II

- 1 Larkin, A.I., Khmel'nitskii, D.E., Zh. Eksp. Teor. Fiz. 56, 2087 (1969; Sov. Phys. JETP 29, 1123 (1969))
- 2 Aharony, A., Phys. Rev. B13, 2092 (1976)
- 3 Schuster, H.G., Z. Physik B27, 251 (1977); Phys. Lett. 62A, 47 (1977); Phys. Lett. 64A, 455 (1978)
- 4 Kötzler, J., et al., to be published
- 5 Grinstein, G. and Luther, A., Phys. Rev. B13, 1329 (1976)
- 6 Oguchi, T., J. Phys. Soc. Japan 26, 580 (1969)
- 7 Idogaki, T. and Uryû, N., J. Phys. Soc. Japan 43, 845 (1977)
- 8 Brëzin, E. and Zinn-Justin, J., Phys. Rev. B13, 251 (1975)
- 9 Kötzler, J. and Eiselt, G., Phys. Lett. 58A, 69 (1976)
- 10 Beauvillain, P. Chappert, C., Renard, J.P. and Griffin, J.A., to be published in J. of Phys.
- 11 Liebmann, R., Schaub, B., Schuster, H.G., Z. Physik B37, 69 (1980)
- 12 Kötzler, J., Reinhardt, H., Liebmann, R., Schuster, H.G., to be published in Phys. Rev. Lett. 1980

Erläuterungen zu den Abbildungen

- Fig. 1 Die R.G. Flußlinien in der $u - \Delta$ Ebene. Die Pfeile zeigen die Flußrichtung an für $x \rightarrow \infty$, d.h. $T \rightarrow T_c$. Nur diejenigen Linien, die im nichtschraffierten Gebiet der Ebene beginnen, erreichen den Gaußschen Fixpunkt $u = \Delta = 0$.
- Fig. 2 Die große Breite des crossover Bereiches vom reinen zum verunreinigten Verhalten für 3 Werte von u^* . Eine Einheit auf der Abszisse entspricht einer Änderung der reduzierten Temperatur t von 100 Zehnerpotenzen.
- Fig. 3 Der effektive Exponent $\bar{\gamma}$ ist gegen $2\Delta_0 / u_0$ aufgetragen (d.h. verschiedene Konzentrationen x) für verschiedene Werte β .
- Fig. 4 $1 / u(t)$ (normiert auf 1 für $\ln t = 0$) gegen $\ln t$ für verschiedene Werte von Δ_0 und $\beta = 3$.
- Fig. 5 Die effektiven kritischen Suszeptibilitätsexponenten für uniaxiale Ferromagnete als Funktion der Verunreinigungskonzentration x . Die durchgezogene Linie entspricht dem Resultat der R.G. Rechnung für kleine x (ohne zusätzlichen freien Parameter).

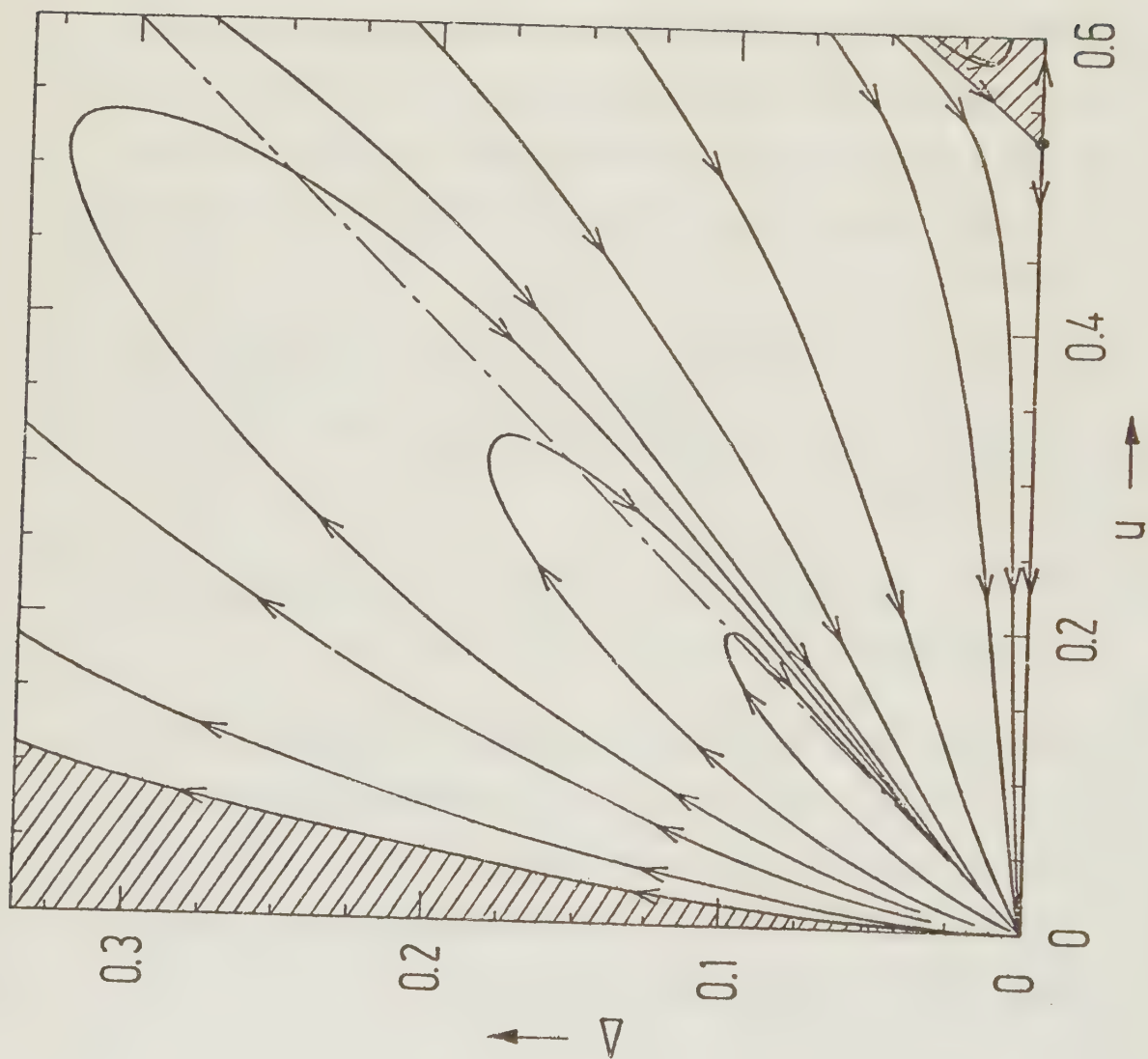


Fig.1

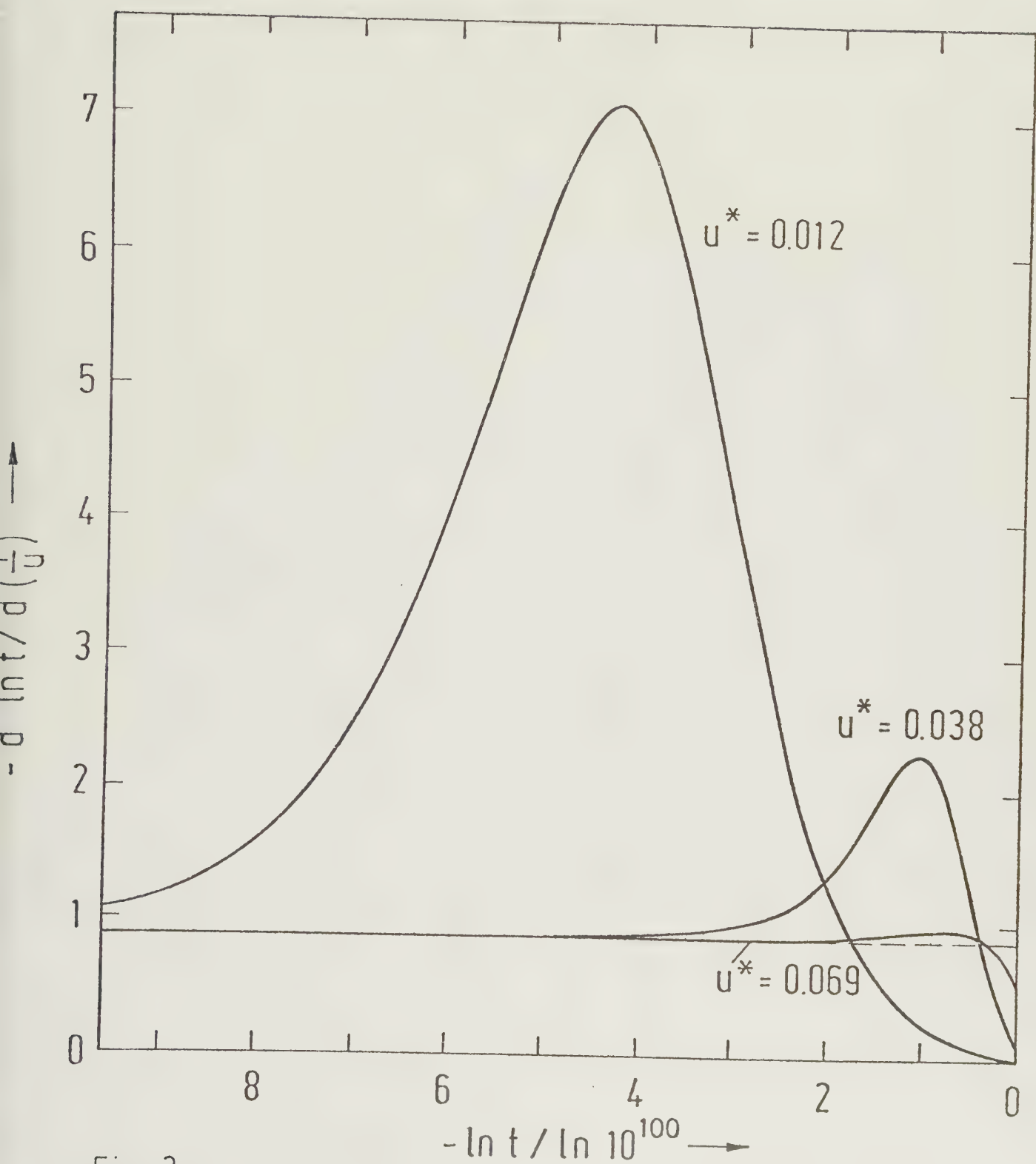


Fig. 2

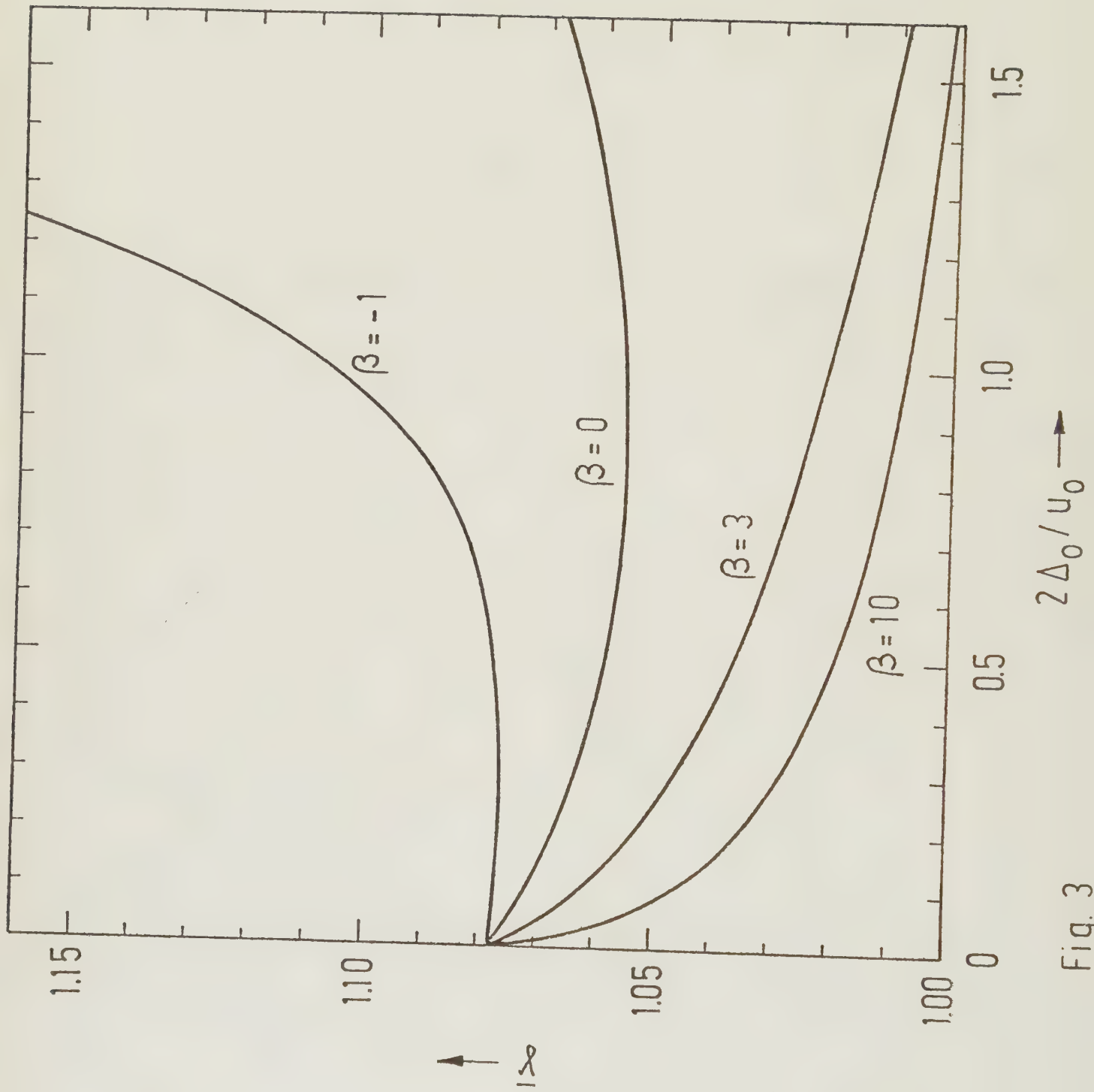


Fig. 3

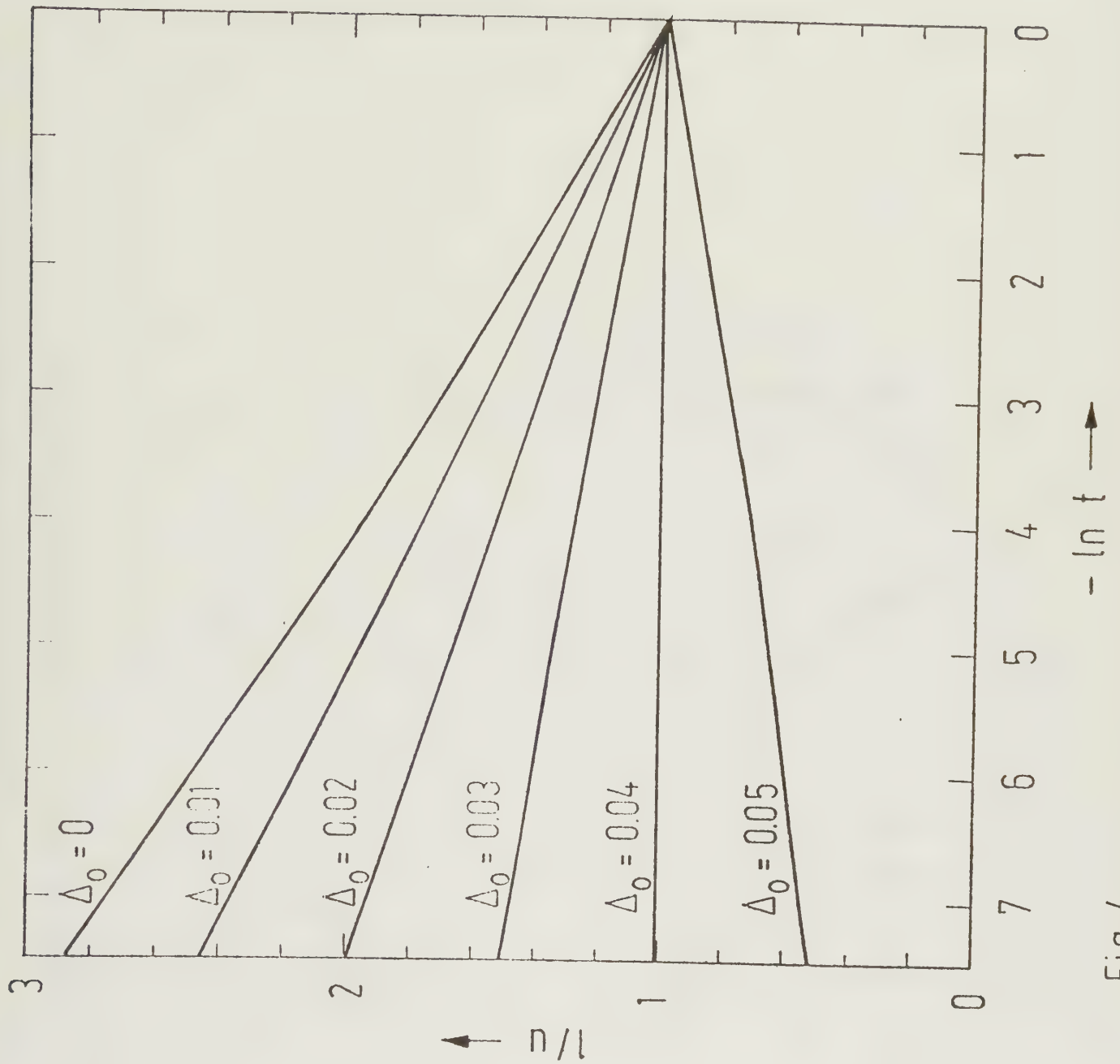


Fig. 4

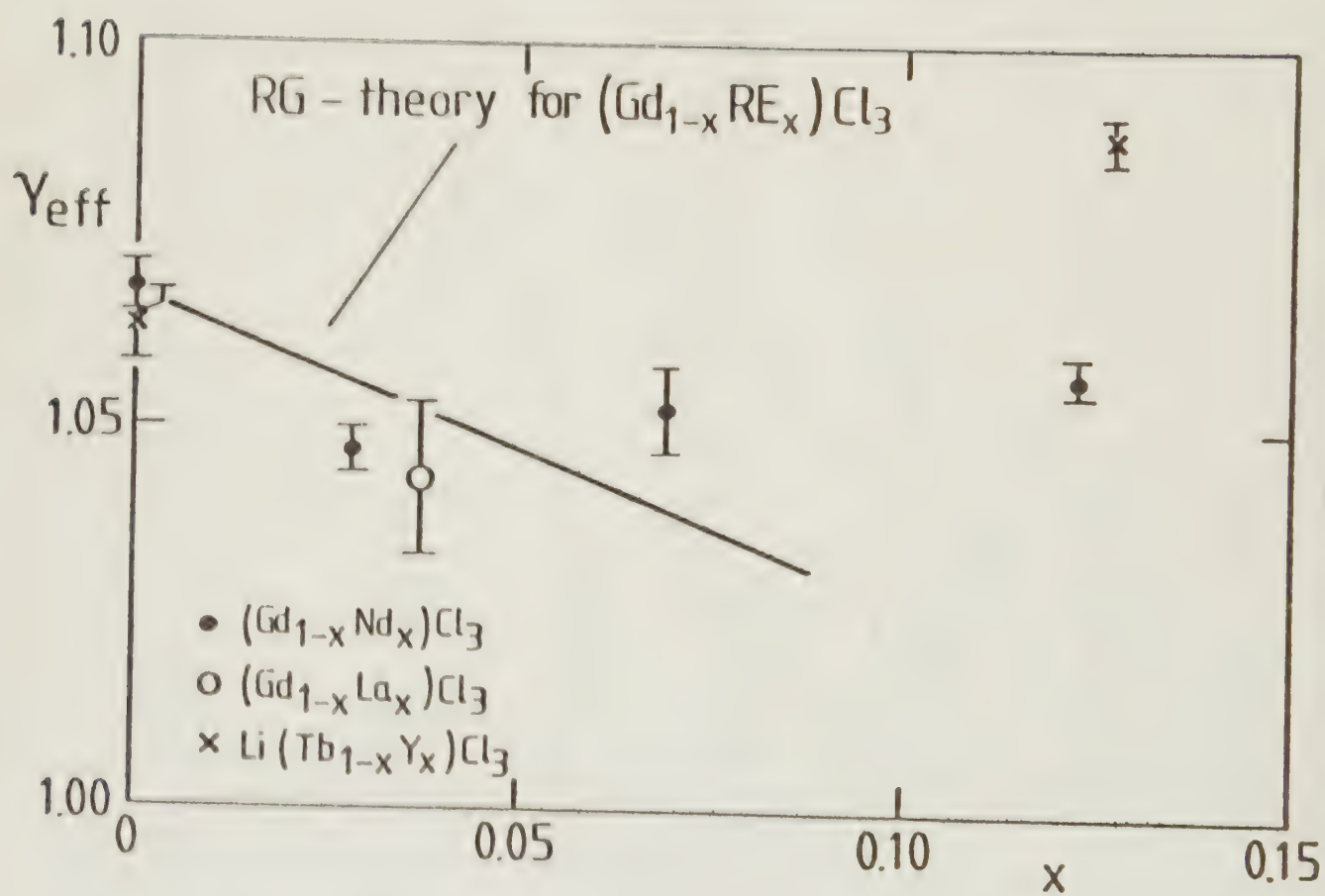


Fig 5

TEIL III

BEWEGUNGSGLEICHUNG
UND
NICHTLINEARE ANTWORT
FÜR
EINEN DIPOLAREN UNIAXIALEN
FERROMAGNETEN
IN DER UMGEBUNG
DES KRITISCHEN PUNKTES

1. Einleitung

Vor einiger Zeit wurde für ein einkomponentiges Ginzburg-Landau-Feld eine Bewegungsgleichung hergeleitet, welche das Verhalten des Ordnungsparameters in der Umgebung der kritischen Temperatur T_c beschreibt [1]. Diese Gleichung wurde in einer Skalenform angegeben, welche durch die Renormierungsgruppe (R.G.) bestimmt ist, und wurde in 1.Ordnung in $\epsilon = 4 - d$ berechnet. Dabei wurde ein Memory Term gefunden, welcher in niedrigster Ordnung die volle nichtlineare Antwort des Ordnungsparameters enthält. In der vorliegenden Arbeit soll nun die Bewegungsgleichung für einen reinen uniaxialen Ferromagneten mit Dipolwechselwirkung betrachtet werden, und es sollen die Eigenschaften und experimentellen Konsequenzen in der Umgebung von T_c diskutiert werden.

Uniaxiale Systeme mit sowohl kurzreichweitiger Austauschwechselwirkung als auch langreichweitiger Dipolwechselwirkung wurden mit der Renormierungsgruppentheorie sehr intensiv untersucht [2], da diese Systeme von besonderem Interesse für einen Test der R.G. sind. Dies hat zwei Gründe a) diese Systeme zeigen ein vierdimensionales kritisches Verhalten, welches die ϵ -Entwicklung vermeidet und b) die kritischen Singularitäten und Amplitudenverhältnisse der reinen Systeme wurden mit großer Genauigkeit gemessen, in Übereinstimmung mit R.G.-Rechnungen [3-5].

Die vorliegende Arbeit ist folgendermaßen gegliedert:

In Abschnitt 2 wird das Modell definiert und die Bewegungsgleichung allgemein angegeben. In Abschnitt 3 wird die Bewegungsgleichung für $d = 4$ hergeleitet und die R.G.-Gleichung wird bestimmt. In Abschnitt 4 berechnen wir eine lineare und eine nichtlineare Relaxationszeit und in Abschnitt 5 geben wir ein Potenzgesetz für die

Magnetisierung bei T_c an. In Abschnitt 6 wird die explizite Lösung für $T > T_c$ in niedrigster Ordnung der 4 Spinkopplungskonstanten u hergeleitet und in Abschnitt 7 berechnen wir die lineare Antwort für ein äußeres statisches Magnetfeld, wiederum in niedrigster Ordnung. In Abschnitt 8 wird die nichtlineare Antwort für den M^3 Term (M ist die Magnetisierung) bestimmt und in Abschnitt 9 wird die lineare Antwort bis zur Ordnung $O(M \cdot u)$ für ein äußeres statisches Magnetfeld berechnet. Unter Verwendung der in Abschnitt 9 berechneten linearen Antwort, in welche der linearisierte Memory-Term eingeht, werden wir schließlich in Abschnitt 10 einen magnetfeldabhängigen kinetischen Koeffizienten für uniaxiale dipolare Ferromagnete berechnen.

2. Definition des Modells

Wir beginnen mit dem Ginzburg-Landau-Hamiltonian [6] für ein d -dimensionales System. Wie bereits erwähnt, zeigen die uniaxialen Magnete wegen der dipolaren Wechselwirkung ein vierdimensionales Verhalten. Deshalb setzen wir nach der Renormierung der Bewegungsgleichung $d = 4$.

$$H = \int d^d x \left\{ \frac{\tau_0}{2} S^2(x) + \frac{1}{2} (\nabla S(x))^2 + \frac{v_0}{4!} S^4(x) \right\}. \quad (1)$$

Hier ist $S(x)$ eine einkomponentige Spindichte, $\tau_0 \propto T - T_c$, wobei T und T_c^0 die Temperatur bzw. die mean-field Übergangstemperatur sind.

Die Dynamik der Spindichte wird beschrieben durch eine zeitabhängige Ginzburg-Landau-Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} S(x,t) = -\Gamma_0 K(S(x,t)) + n(x,t)$$

(2)

$$K(S(x,t)) = \frac{\delta H}{\delta S(x,t)},$$

wobei Γ_0 der unrenormierte kinetische Koeffizient ist und die Langevinkräfte $n(x,t)$ gaußkorreliert sind:

$$\langle n(x,t) n(x',t') \rangle = 2 \Gamma_0 \cdot \delta(x - x') \cdot \delta(t - t'). \quad (3)$$

Dieses Modell, welches die Relaxation eines nichterhaltenen Ordnungsparameters beschreibt, kann äquivalent mit einem Funktional J beschrieben werden:

$$J = \int d^d x \int dt \{ \tilde{S} \Gamma_0 \tilde{S} - S[\dot{\tilde{S}} - K(S)] \}, \quad (4)$$

welches zuerst von Bausch, Janssen und Wagner [7] eingeführt wurde. $\tilde{S}$ ist ein unphysikalisches Zusatzfeld.

In [1] wurde die Bewegungsgleichung für den Ordnungsparameter in gleicher Weise hergeleitet, in der man die Zustandsgleichung im statischen Feld herleitet. Die Bewegungsgleichung ist gegeben durch

$$\tilde{H}(t) = \frac{\delta \Gamma\{\tilde{M}, M\}}{\delta \tilde{M}(t)} \bigg|_{M(t)=0}, \quad (5)$$

wobei $\Gamma\{\tilde{M}, M\}$ die Legendre Transformierte

$$\Gamma\{\tilde{M}, M\} = -W\{\tilde{H}, H\} + \int d^d x \int dt [\tilde{H} \cdot \tilde{M} + H \cdot M] \quad (6)$$

des kumulanten erzeugenden Funktionals

(7)

$$W\{\tilde{H}, H\} = \ln \int \{d(i\tilde{S}), S\} \cdot \exp \{J + \int d^d x \int dt [\tilde{H} \cdot \tilde{S} + H \cdot S]\}$$

ist. Dabei sind $\tilde{M} = \frac{\delta W}{\delta \tilde{H}}$, $M = \frac{\delta W}{\delta H}$ die Mittelwerte von $\tilde{S}$ und S . Für einen physikalischen Prozess gilt $H = 0$, woraus folgt $\tilde{M} = 0$, während $\tilde{H}$ ein äußeres räumlich isotropes Feld ist.

3. Bewegungsgleichung, R.G.-Gleichung

Nach der Renormierung der erhaltenen Bewegungsgleichung bis zur Ordnung u erhalten wir [8]:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(t) = & \frac{1}{\bar{\Gamma}_0} \cdot \frac{\partial}{\partial t} m(t) + Tm(t) + \frac{\hat{u}}{6} m^3(t) + \frac{m \hat{u}}{4} \left[\left(T + \frac{\hat{u}}{2} m^2(t) \right) \right. \\ & \times \ln \left(T + \frac{\hat{u}}{2} m^2(t) \right) + 2 \bar{\Gamma}_0 \cdot \int_0^\infty ds \frac{1}{(2 \bar{\Gamma}_0 \cdot s)^2} \\ & \left. \times \left\{ e^{-2 \bar{\Gamma}_0 \cdot \int_0^s ds' [T + \frac{\hat{u}}{2} m^2(t - s')] - 2 \bar{\Gamma}_0 \cdot s [T + \frac{\hat{u}}{2} m^2(t)]} - e \right\} \right] \end{aligned} \quad (8)$$

In (8) wurden außer der Zeit t dimensionslose Größen eingeführt, welche für $d = 4$ sind:

$$\begin{aligned} \mathcal{K} = & \tilde{H} \mu^{-1/\bar{\Gamma}_0} \cdot (S_4)^{1/2}, \quad m = \mu^{-1} \cdot M/(S_4)^{1/2}, \quad \bar{\Gamma}_0 = Z_\Gamma^{-1} \cdot \Gamma_0 \cdot \mu^2, \\ T = & \tau/\mu^2, \quad \hat{u} = u \cdot S_4 \quad \text{mit} \quad S_4 = 1/8 \pi^2. \end{aligned}$$

Z_Γ ist ein dynamischer Renormierungsfaktor. τ ist die renormierte Temperatur ($\tau \propto T - T_c$), u ist die renormierte 4-Spinkopplungskonstante mit $v_0 = \mu^\epsilon \cdot u_0$. Der Parameter μ hat die Dimension einer inversen Länge.

Die in (8) angegebene Bewegungsgleichung ist eine nicht

Markov'sche Gleichung, welche nichtlineare Response des Ordnungsparameters in beliebig hoher Ordnung enthält.

Neben der Bewegungsgleichung erhält man noch eine R.G.-Gleichung, welche aus der Unabhängigkeit der unrenormierten Theorie von der externen Längenskala μ^{-1} resultiert.

$$0 = \left(\frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{v \cdot \beta} \frac{\partial}{\partial \ln T} + \frac{Z}{\beta} \frac{\partial}{\partial \ln \bar{T}_0} - \frac{\hat{\beta}}{v \cdot \beta} \int dt \frac{\delta}{\delta \ln m(t)} + \right. \quad (9)$$

$$\left. + \frac{\hat{\beta} \cdot \delta}{v \cdot \beta} \right) \cdot \mathcal{X}_t(u, T, \bar{T}_0, \{m(t)\})$$

mit der Lösung:

$$\mathcal{X}_t(u, T, \bar{T}_0, \{m(t)\}) = e^{\int_u^{\bar{u}} du' \frac{\hat{\beta} \cdot \delta}{v \cdot \beta}} \cdot \mathcal{X}_t(\bar{u}, T) \cdot e^{-\int_u^{\bar{u}} du' \frac{1}{v \cdot \beta}},$$

$$\times \bar{T}_0 \cdot e^{\int_u^{\bar{u}} du' \frac{Z}{\beta}}, \{m(t) \cdot e^{-\int_u^{\bar{u}} du' \frac{\hat{\beta}}{v \cdot \beta}}\} \quad (10)$$

Die kritischen Exponenten $\delta, \hat{\beta}, \nu, n$ und die Wilsonfunktion β als Funktionen von u sind in [9] angegeben und der dynamische kritische Exponent $Z = 2 + \bar{c} \cdot n$ (Abschnitt 5).

4. Lineare und Nichtlineare Relaxationszeit

Für T nahe T_c im asymptotischen Bereich, ergibt die R.G.-Gleichung für Relaxation mit $\mathcal{X}(t) = 0$:

$$m(t) = e^{\int_u^{\bar{u}} \frac{\hat{\beta}}{v \cdot \beta} du'} \cdot f(t) \cdot e^{\int_u^{\bar{u}} du' \cdot \frac{Z}{\beta}}, m(0) \cdot e^{-\int_u^{\bar{u}} \frac{\hat{\beta}}{v \cdot \beta} du'} \quad (11)$$

Definiert man eine Relaxationszeit als Zeitintegral über $m(t)$

[1, 10, 11]

$$T_{\text{rel}} \equiv \int_0^{\infty} dt \frac{m(t)}{m(0)} \quad , \quad (12)$$

so erhält man mit

$$T \cdot e^{-\int_u^{\bar{u}} du' \frac{1}{v \cdot \beta}} = 1 :$$

$$T_{\text{rel}} = e^{-\int_u^{\bar{u}} du' \cdot \frac{Z}{\beta}} \cdot \int_0^{\infty} dy \frac{f(x, y)}{x} \equiv e^{-\int_u^{\bar{u}} du' \frac{Z}{\beta}} c(x), \quad (13)$$

wobei
$$x \sim \frac{m(0)}{e^{\int_u^{\bar{u}} \frac{\hat{\beta}}{v \cdot \beta} du'}}$$

Unter der Annahme, daß $c(x) \rightarrow c_0$ für $x \rightarrow 0$ und $c(x) \rightarrow \frac{c_{\infty}}{x}$ für $x \rightarrow \infty$ mit c_0, c_{∞} endlich erhält man schließlich eine lineare und eine nichtlineare Relaxationszeit [1]. Die lineare Relaxationszeit stimmt überein mit Experimenten an GdCl_3 [3].

$$T_{\text{rel}}^{\text{linear}} \sim (|T| \cdot |\ln T|^{-1/3})^{-1} \quad , \quad (14)$$

$$T_{\text{rel}}^{\text{nichtlinear}} \sim (|T|^{1/2} \cdot |\ln T|^{-1/6})^{-1} \quad (15)$$

$$= (T_{\text{rel}}^{\text{linear}})^{1/2} \quad .$$

Diese Resultate, welche eine erste globale Information über die nichtlineare Relaxation von $m(t)$ geben, können folgendermaßen interpretiert werden:

Startet man mit einem kleinen $m(0)$ (verglichen mit der spontanen Magnetisierung), dann findet lineare Relaxation statt, und man erhält eine lineare Relaxationszeit. Startet man mit großem $m(0)$,

findet nichtlineare Relaxation statt, und das Zeitintegral (12) liefert eine nichtlineare Relaxationszeit. Diese Resultate werden klarer werden nach der Diskussion der expliziten Lösung für $m(t)$ in Abschnitt 6.

5. Relaxation am kritischen Punkt

Aus der R.G.-Gleichung erhalten wir ein Potenzgesetz für den Zeitverlauf der Magnetisierung bei T_c . Nehmen wir einen Relaxationsprozess an, mit

$$\chi_t = \begin{cases} \infty & \text{für } t < 0 \\ 0 & \text{für } t = 0 \end{cases},$$

so erhalten wir von der R.G.-Gleichung (10) mit der Substitution $\overline{T}_0 \cdot t \rightarrow t$

$$\chi_t \{ \{ m(t) \} \} = \chi_t \left(\left\{ e^{-\int_u^{\overline{u}} du'} \cdot \frac{\hat{\beta}}{v \cdot \beta} \cdot m(t) e^{-\int_u^{\overline{u}} \frac{z}{\beta} du'} \right\} \right) \quad (16)$$

die Relaxation

$$m(t) \sim e^{\int_u^{\overline{u}} du' \cdot \frac{\hat{\beta}}{v \cdot \beta}} \cdot m(t) \cdot e^{\int_u^{\overline{u}} du' \cdot \frac{z}{\beta}}, \quad (17)$$

von welcher wir mit $e^{\int_u^{\overline{u}} du' \cdot \frac{z}{\beta}} \cdot t \equiv 1$ ein Potenzgesetz erhalten:

$$m(t) \sim (t)^{-1/2} \cdot \left(1 - \frac{D}{\ln t} \right) \cdot (\ln t)^{1/6} \quad (18)$$

$$D = \frac{4}{3} \cdot \frac{(\overline{c} - 4)}{72}, \quad \overline{c} = 2/9 c, \quad c = 6 \cdot \ln\left(\frac{4}{3}\right) - 1.$$

Der logarithmische Korrekturterm $(1 - \frac{D}{\ln t})$ kommt vom $O(u^2)$ -Beitrag in $Z = 2 + \bar{c} \cdot \eta$. Der Zusatzfaktor $2/9$ tritt auf für uniaxiale Systeme, da Brezin in [12] gezeigt hat, daß bis zur 2. Loop Ordnung reine uniaxiale Systeme und vierdimensionale Systeme sich in einem numerischen Faktor unterscheiden, mit welchem der kritische Exponent η multipliziert wird.

6. Explizite Lösung in niedrigster Ordnung

Ohne den Memory Term und den logarithmischen Term der Ordnung $O(m \cdot \hat{u})$ kann die Bewegungsgleichung für Relaxation mit $\mathcal{X}(t) = 0$ in der mean-field-Theorie geschrieben werden:

$$0 = \left(-\frac{1}{T_0} \partial_t + T + \frac{\hat{u}}{6} m^2(t) \right) m(t) + O(\hat{u} \cdot m) \quad (19)$$

Der letzte Term $O(m \cdot \hat{u})$ ist klein im kritischen Bereich (Tabelle 1) und wird in Abschnitt 9 diskutiert werden. Aus der R.G.-Gleichung erhält man mit

$$T = e^{-\int \bar{u}} du' \cdot \frac{1}{v \cdot \beta} = \text{sgn } T \equiv \sigma$$

mit $w = 2 \cdot t \cdot \omega_c(T)$ und $n(w) = \frac{m(w)}{m_s}$, wobei die charakteristische Frequenz $\omega_c(T)$, $\bar{u}(T)$ und die Magnetisierung $m_s(T)$ in Tabelle 1 angegeben sind, folgende Relaxationsgleichung:

$$0 = \frac{\partial}{\partial w} n^2(w) + \sigma \cdot n^2(w) + \frac{1}{6} n^4(w) \quad (20)$$

Die Lösung ist für $T > T_c$ ($\sigma = +1$) (Abb.1)

$$m(t) = m(0) \cdot \frac{e^{-\omega_c \cdot t}}{\left(1 + \frac{1}{6} \frac{m^2(0)}{m_s^2} \cdot (1 - e^{-2 \cdot \omega_c \cdot t})\right)^{1/2}} \quad (21)$$

mit $m(t=0) = m(0)$ und $m(t) \rightarrow 0$ für $t \rightarrow \infty$.

Für $T < T_c$ erhält man

$$\frac{m(t)}{m_s} = \frac{m(0)}{m_s} \cdot \frac{e^{\omega_c \cdot t}}{\left(1 - \frac{1}{6} \frac{m^2(0)}{m_s^2} \cdot (1 - e^{2 \cdot \omega_c \cdot t})\right)^{1/2}} \quad (22)$$

mit $m(t) \rightarrow m_s$ für $t \rightarrow \infty$. m_s ist für $T < T_c$ die spontane Magnetisierung (bis auf einen Faktor). Betrachtet man die Resultate (21), (22) und Abb.1, dann sieht man, daß für $T > T_c$ und $\frac{m^2(0)}{m_s^2} \ll 6$ lineare Relaxation auftritt, während für $\frac{m^2(0)}{m_s^2} \gg 6$

starke Abweichungen von der linearen Relaxation auftreten. Für $T < T_c$ findet man lineare Relaxation für $0 < \frac{m^2(0)}{m_s^2} - 6 \ll 1$.

7. Die lineare Antwort auf ein endliches äußeres Feld in niedrigster Ordnung

Wir machen nun die Linearisierung $\bar{\mathcal{H}} = \bar{\mathcal{H}}_0 + \bar{\mathcal{H}}_1(t)$, wobei

$$\bar{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{H}}{(L)^{1/2} \cdot (T)^{3/2}} \quad (L \text{ ist in Tabelle 1 angegeben}),$$

und $m = m(\mathcal{H}_0) + m_1(t)$ in (8) und erhalten aus der R.G.-Gleichung

$$\text{mit} \quad T \cdot e^{-\int_u^{\bar{u}} du'} \cdot \frac{1}{v \cdot \beta} = 1$$

für $T < T_c$:

$$\bar{\mathcal{M}}_0 = \frac{m(\bar{\mathcal{H}}_0)}{m_s} + \frac{1}{6} \frac{m^3(\bar{\mathcal{H}}_0)}{m_s^3} \quad (23)$$

die (statische) Zustandsgleichung in niedrigster Ordnung in $\bar{u}(T)$. Die linearisierte Bewegungsgleichung lautet für $T > T_c$:

$$\bar{\mathcal{M}}_1 = \frac{1}{\omega_c} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \frac{m_1(t)}{m_s} + \frac{1}{2} \frac{m^2(\bar{\mathcal{H}}_0)}{m_s^2} \frac{m_1(t)}{m_s} \quad (24)$$

Nach Fouriertransformation erhält man für $T > T_c$ die dynamische Suszeptibilität

$$\chi(\omega) = \frac{m_1(\omega)}{\mathcal{H}_1(\omega)} = \frac{\chi(T)}{-\frac{i\omega}{\omega_c} + 1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_s^2}} \quad (25)$$

$\chi(T)$ ist in Tabelle 1 angegeben.

(25) zeigt, daß man für ein endliches äußeres Magnetfeld eine Lorentz-Formfunktion erwarten kann (wie im Falle $\mathcal{H}_0 = 0$), aber mit einer modifizierten charakteristischen Frequenz

$$\omega_{\text{eff}} = \omega_c \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_s^2} \right),$$

wobei $m(\mathcal{H}_0)$ die (meßbare) Magnetisierung in einem äußeren Feld $\mathcal{H}_0$ ist und m_s in Tabelle 1 angegeben ist.

Hier und in der weiteren Diskussion betrachten wir nur den Fall, für den das Magnetfeld parallel zur z-Achse des Systems ist [3].

Für $T \sim T_c$ erhalten wir:

$$\chi(\omega) = \frac{\chi(T)}{-\frac{i\omega}{\omega_c} - 1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_s^2}} \quad (26)$$

Für $T = T_c$, am kritischen Punkt, erhalten wir unter Berücksichtigung der R.G.-Gleichung mit

$$\omega \cdot (\bar{\Gamma}_0 \cdot e^{\int_u^{\bar{u}} du' \frac{Z}{\beta}})^{-1} = 1,$$

$$\chi(\omega) = \frac{\frac{\bar{\Gamma}_0}{\omega}}{-i + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{K}_0)}{m_\omega^2}} \quad (27)$$

mit

$$m_\omega^2 = (L^{-1} \cdot \frac{\bar{\Gamma}_0}{\omega} \cdot |\ln \frac{\bar{\Gamma}_0}{\omega}|^{-1})^{-1}. \quad (28)$$

Für die statische Zustandsgleichung erhält man mit

$$m(\mathcal{K}_0) \cdot e^{-\int_u^{\bar{u}} \frac{\hat{\beta}}{v \cdot \beta} du'} = 1$$

das bereits bekannte Resultat [9]:

$$\mathcal{K}_0 \propto \frac{m^3(\mathcal{K}_0)}{|\ln m(\mathcal{K}_0)|} \quad (T = T_c)$$

8. Die nichtlineare Antwort in niedrigster Ordnung

Da die Bewegungsgleichung in der Magnetisierung nichtlinear ist (der lineare Term verschwindet für $T \rightarrow T_c$), erwartet man eine deutliche nichtlineare Antwort in der Umgebung von T_c . Dementsprechend berechnen wir eine nichtlineare Antwort mit der Frequenz 2ω bzw. 3ω . Diese nichtlinearen Suszeptibilitäten kann man berechnen mit der Methode der sukzessiven Approximation [13] für den $\hat{u} \cdot m^3$ Term in Potenzen der Feldamplituden. Wir

beginnen mit der Gleichung

$$\bar{\mathcal{K}} = \frac{1}{\omega_c} \frac{\partial}{\partial t} \frac{m(t)}{m_s} + \sigma \frac{m(t)}{m_s} + \frac{1}{6} \frac{m^3(t)}{m_s^3} \quad (29)$$

mit $\bar{\mathcal{K}} = \bar{\mathcal{K}}_0 + \bar{\mathcal{K}}_1$ und dem Ansatz [13] :

$$m(\omega) = \mathcal{K}_1(\omega) \cdot \chi_1(\omega) + \bar{\mathcal{K}}_1(\omega) \cdot \bar{\mathcal{K}}_1(\omega) \cdot \chi_2(2\omega) + \dots$$

Für $T > T_c$ und $\bar{\mathcal{K}}_0 = 0$ erhält man von (29) nach Fouriertransformation eine Antwort auf das Feld $\mathcal{K}_1(t)$, welche die Frequenz 3ω enthält:

$$\begin{aligned} \chi_3(3\omega, \omega, \omega, \omega) &= - \frac{\chi^{-1}(T)}{6 \cdot m_s^2} \cdot \frac{\chi^3(T)}{\left(-\frac{i\omega}{\omega_c} + 1\right)^3 \cdot \left(-\frac{3i\omega}{\omega_c} + 1\right)} \quad (30) \\ &= - \frac{2}{9} |\ln T|^{-1} \cdot \chi_1^3(\omega) \cdot \frac{1}{\left(-\frac{3i\omega}{\omega_c} + 1\right)} \end{aligned}$$

Aus (30) folgt, daß die nichtlineare Antwort mit der Frequenz 3ω eine Lorentz-Formfunktion hat, welche mit der dritten Potenz der linearen Antwort multipliziert wird.

Wenn $m(\mathcal{K}_0) \neq 0$ und $T > T_c$ erhält man eine nichtlineare Antwort auf $\mathcal{K}_1$ mit der Frequenz 2ω :

$$\begin{aligned} \chi_2(2\omega, \omega, \omega) &= - \frac{1}{2} \frac{m(\mathcal{K}_0) \cdot \chi^{-1}(T)}{m_s^2} \cdot \frac{\chi^2(T)}{\left(-\frac{2i\omega}{\omega_c} + 1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{K}_0)}{m_s^2}\right)} \times \\ &\times \frac{1}{\left(-\frac{i\omega}{\omega_c} + 1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{K}_0)}{m_s^2}\right)^2} \quad (31) \end{aligned}$$

$$= - \frac{2}{3} m(\chi_0) \cdot |\ln T|^{-1} \cdot \chi_1(\omega)^2 \cdot \frac{1}{\left(-\frac{2i\omega}{\omega_c} + 1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\chi_0)}{m_s^2}\right)}$$

Für $T < T_c$, wenn eine spontane Magnetisierung vorhanden ist, nimmt die Beziehung (31) folgende Form an:

$$\chi_2(2\omega, \omega, \omega) = - \frac{2}{3} m(\chi_0) \cdot |\ln T|^{-1} \cdot \frac{1}{\left(-\frac{2i\omega}{\omega_c} - 1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\chi_0)}{m_s^2}\right)} \times \quad (32)$$

$$\times \frac{\chi^2(T)}{\left(-\frac{i\omega}{\omega_c} - 1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\chi_0)}{m_s^2}\right)^2}.$$

Für $T = T_c$ erhält man eine nichtlineare Antwort χ_2 und χ_3 :

$$\chi_2(2\omega, \omega, \omega) = - \frac{2}{3} m(\chi_0) \cdot \left|\ln \frac{\bar{\Gamma}_0}{\omega}\right|^{-1} \times$$

$$\times \frac{\left(\frac{\bar{\Gamma}_0}{\omega}\right)^2}{\left(-2i + \frac{1}{2} \frac{m^2(\chi_0)}{m_\omega^2}\right)} \cdot \frac{1}{\left(-i + \frac{1}{2} \frac{m^2(\chi_0)}{m_\omega^2}\right)} \quad (33)$$

und

$$\chi_3(3\omega, \omega, \omega, \omega) = - \frac{2}{9} \left|\ln \frac{\bar{\Gamma}_0}{\omega}\right|^{-1} \cdot \frac{1}{3} \left(\frac{\bar{\Gamma}_0}{\omega}\right)^3, \quad (34)$$

wobei m_ω^2 in Abschnitt 7 angegeben ist.

9. Die lineare Antwort bis zur Ordnung $O(\hat{u} \cdot m)$ für ein
endliches äußeres Feld

Man kann die Bewegungsgleichung unter Mitnahme des Memory
Terms bis zur Ordnung $O(\hat{u} \cdot m)$ unter Verwendung der R.G.-Glei-
chung mit

$$T \cdot e^{\int_u^{\bar{u}} du'} \frac{1}{v \cdot \beta} = \text{sgn } T = \sigma$$

schreiben als

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{K}}(t) = & \frac{1}{\omega_c} \frac{\partial}{\partial t} \frac{m(t)}{m_s} + \left(\sigma + \frac{1}{6} \frac{m^2(t)}{m_s^2} \right) \cdot \frac{m(t)}{m_s} \\ & + \frac{1}{3} |\ln T|^{-1} \left[\left(\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(t)}{m_s^2} \right) \cdot \ln \left(\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(t)}{m_s^2} \right) \right. \\ & \left. + \int_0^\infty \frac{ds}{s^2} \cdot \left\{ e^{-\int_0^s ds' \left[\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(t-s')}{m_s^2} \right]} - e^{-s \left[\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(t)}{m_s^2} \right]} \right\} \right] \times \\ & \times \frac{m(t)}{m_s} . \end{aligned} \quad (35)$$

Wir linearisieren nun wieder $\bar{\mathcal{K}}(t) = \bar{\mathcal{K}}_0 + \bar{\mathcal{K}}_1(t)$, $m(t) = m(\bar{\mathcal{K}}_0) + m_1(t)$ und erhalten die statische Zustandsgleichung mit einem $O(\hat{u} \cdot m)$ Term:

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{K}}_0 = & \left(\sigma + \frac{1}{6} \frac{m^2(\bar{\mathcal{K}}_0)}{m_s^2} \right) \cdot \frac{m(\bar{\mathcal{K}}_0)}{m_s} + \frac{1}{3} |\ln T|^{-1} \cdot \frac{m(\bar{\mathcal{K}}_0)}{m_s} \times \\ & \times \left\{ \left(\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(\bar{\mathcal{K}}_0)}{m_s^2} \right) \cdot \ln \left(\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(\bar{\mathcal{K}}_0)}{m_s^2} \right) \right\} . \end{aligned} \quad (36)$$

Man kann die statische Zustandsgleichung des uniaxialen Ferro-
magneten damit schreiben für $T > T_c$:

$$\frac{m(\mathcal{H}_0)}{\mathcal{H}_0} = \chi(T) \cdot \left\{ 1 + \frac{1}{6} \frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} + \frac{1}{3} |\ln T|^{-1} \cdot m(\mathcal{H}_0) \times \right. \quad (37)$$

$$\times \left[\left(1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} \right) \cdot \ln \left(1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} \right) \right]^{-1} .$$

Die linearisierte Bewegungsgleichung lautet:

$$\overline{\mathcal{H}}_1(t) = \frac{1}{\omega_C} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \frac{m_1(t)}{m_S} + \left(\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} \right) \cdot \frac{m_1(t)}{m_S} + \frac{1}{3} |\ln T|^{-1} \times$$

$$\times \left[\left(\sigma + \frac{3}{2} \frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} \right) \cdot \ln \left(\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} \right) \cdot \frac{m_1(t)}{m_S} + \frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} \times \right.$$

$$\times \int_0^\infty \frac{ds}{s^2} \cdot \left\{ e^{-\int_0^s ds' \left[\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} \right]} \cdot \omega_C \right.$$

$$\left. \left. \int_0^s ds' \left(\frac{m_1(t)}{m_S} - \frac{m_1(t-s')}{m_S} \right) \right\} \right] . \quad (38)$$

Wichtig ist, daß der logarithmische Term und der Memory Term für $m(\mathcal{H}_0) = 0$ verschwinden. Der Integralterm kann in der folgenden Form geschrieben werden [1] :

$$\frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} \cdot \int_0^\infty ds [E_1(A \cdot s) - E_2(A \cdot s)] \cdot \frac{\partial_s m_1(t-s)}{m_S} \quad (39)$$

$$\text{mit } A = \left(\sigma + \frac{1}{2} \frac{m^2(\overline{\mathcal{H}}_0)}{m_S^2} \right) \cdot \omega_C$$

$$\text{und } E_n(Z) = \int_1^\infty dx \cdot x^{-n} \cdot e^{-Z \cdot x} .$$

Nach Fouriertransformation erhält man die dynamische Suszeptibilität $\chi(\omega) = \frac{m_1(\omega)}{l(\omega)}$ für $T > T_C$:

$$\chi(\omega) = \chi(T) \cdot \left\{ -i \frac{\omega}{\omega_C} + 1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} + \frac{1}{3} |\ln T|^{-1} \times \right.$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[\left(1 + \frac{3}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right) \cdot \ln \left(1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right) - \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right. \\
 & \times \left[1 + \frac{1 - \frac{i \omega}{2 \cdot \omega_C \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right)}}{\frac{i \omega}{2 \cdot \omega_C \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right)}} \right. \\
 & \times \left. \left. \ln \left(1 - \frac{i \omega}{2 \cdot \omega_C \cdot \left(1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right)} \right) \right] \right]^{-1} . \quad (40)
 \end{aligned}$$

Dieses Resultat ergibt nur eine kleine Abweichung von der Lorentz-Formfunktion [1].

Für $T < T_C$ erhält man:

$$\begin{aligned}
 \chi(\omega) &= \chi(T) \cdot \left\{ -i \cdot \frac{\omega}{\omega_C} - 1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} + \frac{1}{3} |\ln T|^{-1} \cdot \right. \\
 & \times \left[\left(-1 + \frac{3}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right) \cdot \ln \left(-1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right) - \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right. \\
 & \times \left[1 + \frac{1 - \frac{i \omega}{2 \cdot \omega_C \cdot \left(-1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right)}}{\frac{i \omega}{2 \cdot \omega_C \cdot \left(-1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right)}} \right. \\
 & \times \left. \left. \ln \left(1 - \frac{i \omega}{2 \cdot \omega_C \cdot \left(-1 + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_S^2} \right)} \right) \right] \right]^{-1} . \quad (41)
 \end{aligned}$$

Schließlich erhält man noch am kritischen Punkt T_c :

$$\chi(\omega) = \frac{\bar{\Gamma}_0}{\omega} \left\{ -i + \frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_\omega^2} + \frac{1}{3} \left| \ln \frac{\bar{\Gamma}_0}{\omega} \right| \cdot \left[\frac{3}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_\omega^2} \cdot \ln \left(\frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_\omega^2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_\omega^2} \cdot \left(1 + \frac{1 - \frac{i}{\frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_\omega^2}}}{\frac{i}{\frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_\omega^2}}} \cdot \ln \left(1 - \frac{i}{\frac{1}{2} \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_\omega^2}} \right) \right) \right] \right\}^{-1} \quad (42)$$

10. Magnetfeldabhängigkeit des kinetischen Koeffizienten

Aus der im letzten Abschnitt berechneten linearen Suszeptibilität $\chi(\omega)$ kann man den sogenannten kinetischen Koeffizienten $\bar{\Gamma}$ berechnen,

$$\bar{\Gamma}^{-1} = \frac{d \chi^{-1}(\omega)}{d(-i\omega)} \bigg|_{\omega=0} \quad (43)$$

eine Größe, die in der kritischen Dynamik sehr wichtig ist [14]. Diese Größe hat den Vorteil für Experimente, daß sie eine reine Materialkonstante ist, unabhängig von der Probenform [15].

Benutzt man (43), so erhält man mit (40) für $T > T_c$:

$$\bar{\Gamma} = \frac{\bar{\Gamma}_0}{1 + \frac{1}{f_1} \left| \ln \tau \right| \cdot \frac{\frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{m_\omega^2}}{1 + \frac{m^2(\mathcal{H}_0)}{2 \cdot m_\omega^2}}} \quad (44)$$

wobei wir für die reduzierte Temperatur wieder $\tau \sim T - T_c$ verwendet haben. Man sieht aus (40), daß es gerade die Frequenzabhängigkeit des linearisierten Memory Terms ist, welche zu einer Feldabhängigkeit von $\bar{\Gamma}(\mathcal{H}_0)$ führt. Benutzt man noch die Zustandsgleichung (23) in niedrigster Ordnung in $\bar{u}$ (Tabelle 1) mit $\sigma = 1$ und $m^2(\mathcal{H}_0)/2 \cdot m_s^2 < 1$, dann folgt aus (44) :

$$\bar{\Gamma} = \frac{\bar{\Gamma}_0}{1 + \frac{2}{9} |\ln \tau|^{-1} \cdot \frac{\mathcal{H}_0^2}{|\tau|^3}} \quad (45)$$

Dieses Resultat zeigt a) für konstantes äußeres Feld eine Reduktion des kinetischen Koeffizienten insbesondere nahe bei T_c , b) für konstante Temperatur eine Reduktion von $\bar{\Gamma}$ quadratisch im äußeren Feld $\mathcal{H}_0$. Für $\mathcal{H}_0 = 0$ finden wir $\bar{\Gamma} = \bar{\Gamma}_0$, $\bar{\Gamma}$ bleibt also im kritischen Bereich konstant. Für $T < T_c$ erhält man aus (41), (43) und (23) mit $\mathcal{H}_0 = 0$, $\sigma = -1$:

$$\bar{\Gamma} = \frac{\bar{\Gamma}_0}{1 + \frac{1}{2} \cdot |\ln \tau|^{-1}} \quad (46)$$

Dieses Resultat wurde bereits in der Diplomarbeit [2] berechnet.

Kötzler und Scheithe haben kürzlich [16] Messungen der Feld- und Temperaturabhängigkeit des kinetischen Koeffizienten in dem anisotropen Ferromagneten CrBr_3 durchgeführt. In CrBr_3 nimmt man an, dominiert für $\tau \ll 0.03$ das uniaxiale dipolare kritische Verhalten, während bei größerem τ zweidimensionales Heisenbergverhalten dominieren soll [16].

Für $T > T_c$ wurde eine starke Reduktion von $\bar{\Gamma}$ im äußeren Feld gemessen, besonders in der Umgebung von T_c . Dieses Resultat

tat steht im Widerspruch zu Mode-Kopplungsrechnungen von Maleev [17], der ein Anwachsen von $\bar{\Gamma}$ mit stärkerem Feld berechnet. Unterhalb von T_c wurde ein zu größerem τ hin abnehmendes $\bar{\Gamma}$ gemessen. In beiden Fällen, sowohl für $T > T_c$ als auch für $T < T_c$ ist die beobachtete Reduktion von $\bar{\Gamma}$ allerdings wesentlich größer als es unsere Formeln erwarten lassen. Allerdings ist noch unklar, ob dieser Unterschied von den 2 dimensional Korrelationen in CrBr_3 kommt, oder ein anderer dynamischer Effekt ist, den unsere Bewegungsgleichung nicht enthält. Es wäre deshalb interessant, die Messungen noch einmal an einem idealen uniaxialen System zu wiederholen.

Zusammenfassung und Diskussion

Zusammenfassend kann man sagen, daß Messungen der verschiedenen berechneten dynamischen Größen wichtige Informationen über lineares und nichtlineares Verhalten des Ordnungsparameters in der Umgebung von T_c geben können.

a) Zuerst geben wir ein Potenzgesetz an für den Zeitverlauf der Magnetisierung am kritischen Punkt mit einem kleinen logarithmischen Korrekturterm (18). Wie bereits in Abschnitt 5 erwähnt, würde die Bestimmung des numerischen Faktors, der den logarithmischen Term multipliziert, von großem Interesse sein, da es ein erster Test für den berechneten Unterschied zwischen reinen uniaxialen Systemen und vierdimensionalen Systemen (berechnet bis zur 2-Loop-Ordnung) wäre [12].

b) Weiterhin finden wir eine lineare und eine nichtlineare Relaxationszeit (14,15), welche man als Zeitintegral über die gemess-

sene Magnetisierung $m(t)$ erhält.

c) Für ein endliches äußeres Magnetfeld erhalten wir in (25) eine lineare Antwort, welche eine Lorentz Formfunktion besitzt mit einer modifizierten charakteristischen Frequenz ω_{eff} .

d) Aus der starken Nichtlinearität der Bewegungsgleichung leiten wir nichtlineare Suszeptibilitäten mit Frequenzen 2ω bzw. 3ω her, welche mit logarithmischen Korrekturen modifiziert werden (30,31).

e) In Obereinstimmung mit [1] finden wir eine kleine Abweichung von einer Lorentz-Formfunktion für die lineare Suszeptibilität, die den linearisierten Memory Term enthält (Abschnitt 9).

f) Unter Verwendung der Resultate von Abschnitt 9 berechnen wir einen magnetfeldabhängigen kinetischen Koeffizienten im kritischen Bereich.

Abschließend wollen wir noch bemerken, daß ideale experimentell verfügbare uniaxiale Systeme mit Dipolwechselwirkung LiTbF_4 , GdCl_3 und TbF_3 [4,5] sind.
(Teil III wurde in [18] veröffentlicht.)

Tabelle 1 : Kritisches Verhalten der statischen und dynamischen Größen im asymptotischen Bereich ($\tau \sim T$) .

$\bar{u}(\tau)$	$L^{-1} \cdot \ln \tau ^{-1}$	$L = 3/4$
$\omega_c(\tau)$	$\bar{\Gamma}_0 \cdot \tau \cdot \ln \tau ^{-1/3}$	
$m_s(\tau)$	$(L)^{1/2} \cdot \tau ^{1/2} \cdot \ln \tau ^{1/3}$	
$\chi(\tau)$	$ \tau ^{-1} \cdot \ln \tau ^{1/3}$	

Literaturhinweise zu Teil III

- 1 Bausch, R., Janssen, H.K., Z. Physik B25, 275 (1976)
- 2 Larkin, A.I., Khmel'nitzkii, D.E., Z. Eksp. Theor. Fiz 56, 2087 (1969); Sov. Phys. JETP 29, 1123 (1969);
Aharony, A., Phys. Rev. B8, 3363 (1973);
Folk, R., Iro, H., Schwabl, F., Z. Physik B27, 169 (1977);
Schuster, H.G., Z. Physik B27, 251 (1977); Phys. Lett. 62A, 47 (1977); Phys. Lett. 64A, 455 (1978);
Schaub, B., Schuster, H.G., Z. Physik B31, 177 (1978);
Wilson, K.G., Kogut, J., Phys. Rep. 12C, 75 (1974)
- 3 Kötzler, J., Scheithe, W., Sol. State Comm. 12, 643 (1973);
Kamleiter, G., Kötzler, J., Sol. State Comm. 14, 787 (1974);
Kötzler, J., Kamleiter, G., Weber, G., J. Phys. C9, L361 (1976);
Finger, W., Physica 90B, 251 (1977)
- 4 Ahlers, G., Kornblik, A., Guggenheim, H.J., Phys. Rev. Lett. 34, 1227 (1975);
Frowein, R., Kötzler, J., Z. Physik B25, 279 (1976)
- 5 Brinkmann, J., Courths, R., Guggenheim, H.J., Phys. Rev. Lett. 40, 1286 (1978)
- 6 Grinstein, G., Ma, S.K., Mazenko, G.F., Phys. Rev. B15, 258 (1977)
- 7 Janssen, H.K., Z. Physik B23, 377 (1976);
Bausch, R., Janssen, H.K., Wagner, H., Z. Physik B24, 113 (1976)
- 8 Bausch, R., Eisenriegler, E., Janssen, H.K., Z. Physik B36, 179 (1979)
- 9 Brézin, E., Le Guillou, J.G., Zinn-Justin, J., in: Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. VI, ed. C. Domb and M.S. Green, London, Academic Press 1976
- 10 Racz, Z., Phys. Lett. A53, 422 (1975); Phys. Rev. B13, 263 (1976)

- 11 Fisher, M.E., Racz, Z., Phys. Rev. B13, 5039 (1976)
- 12 Brézin, E., Zinn-Justin, J., Phys. Rev. B13, 251 (1976)
- 13 Bloembergen, N., in: Topics in Nonlinear Physics, ed. N.J. Zabusky, Springer Verlag 1966
- 14 Halperin, B.I., Hohenberg, P.C., Ma, S., Phys. Rev. B10, 139 (1974)
- 15 Kötzler, J., Kamleiter, G., Weber, G., J. Phys. C9, L361 (1976)
- 16 Kötzler, J., Scheithe, W., Phys. Rev. B18, 1306 (1978)
- 17 Maleev, S.V., Zh. Eksp. Teor. Fiz. 69, 1398 (1975); Sov. Phys. JETP 42, 713 (1976)
- 18 Schaub, B., Schuster, H.G., Z. Physik B35, 99 (1979)

Erläuterungen zu den Abbildungen

Fig. 1 Die Magnetisierung $m(T)$ für $T > T_c$ mit $m(0) = 1$ nach (21) als Funktion der Zeit $t [\omega_c^{-1}]$.
Kurve a zeigt lineare Relaxation ($m^2(0)/m_s^2 \ll 1$), d.h. rein exponentielles Verhalten.
Die Kurven b ($\frac{m^2(0)}{m_s^2} = 1$) und c ($\frac{m^2(0)}{m_s^2} = 0.1$) zeigen die nichtlineare Relaxation.

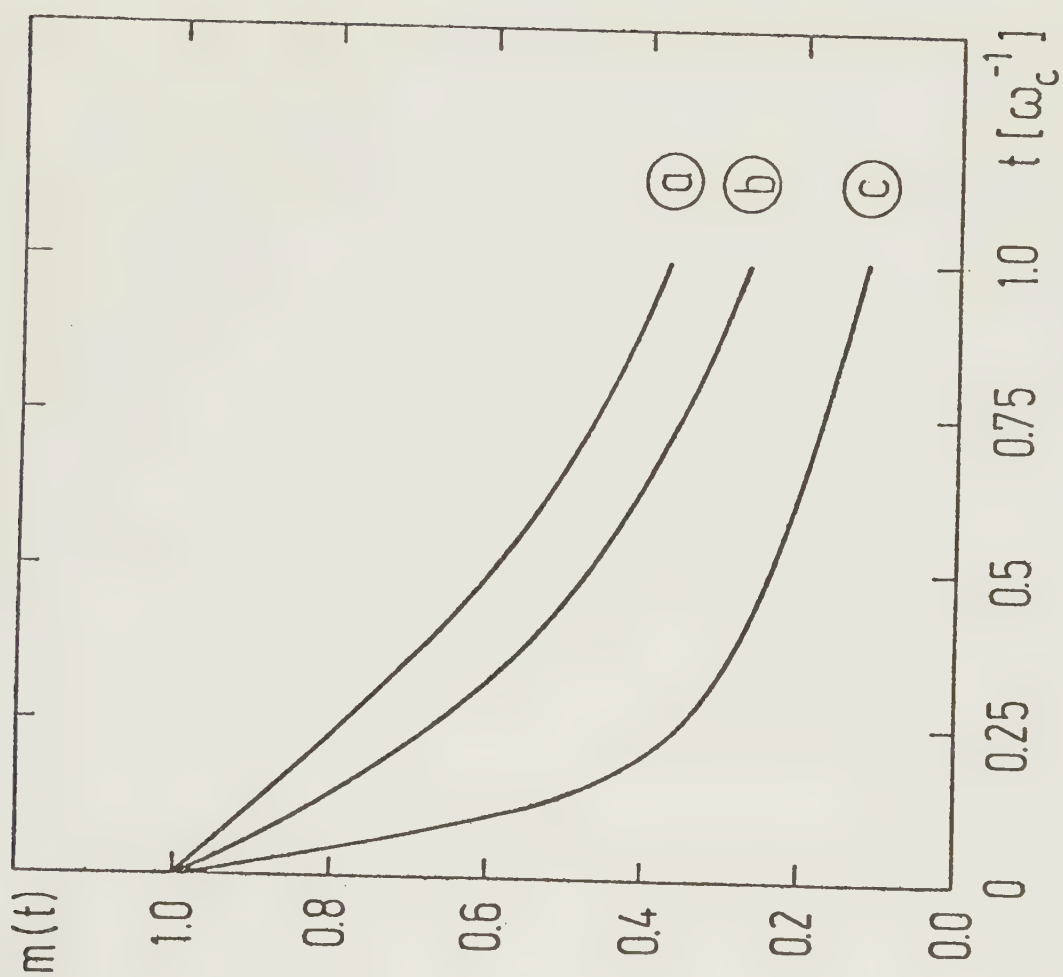


Fig.1 $T > T_c$

TEIL IV

N I C H T L I N E A R E K R I T I S C H E
R E L A X A T I O N
F Ü R
E I N G I N Z B U R G - L A N D A U F E L D
G E K O P P E L T
A N E I N E E R H A L T E N E D I C H T E

1. Einleitung

Vor einiger Zeit [1] sind einige interessante Relaxationsexperimente an ordnenden Legierungen im kritischen Bereich durchgeführt worden. In einigen dieser Systeme ist die Relaxation so langsam, daß sie über makroskopische Zeiten gemessen werden kann. Das heißt, bei solchen Systemen kann man den zeitlichen Verlauf des Zerfalls der Ordnung (Bragg Reflexion) nach einer Änderung der Temperatur von unterhalb T_c nach oberhalb T_c direkt messen. Anders als bei den üblichen Experimenten zur kritischen Dynamik mittels inelastischer Neutronenstreuung, gibt ein solches Experiment direkte Information über die nichtlineare Antwort des Systems bzgl. der Temperaturänderung. Dies ist dann besonders interessant, wenn die Endtemperatur nahe dem kritischen Punkt ist, weil dort der Gültigkeitsbereich der linearen Antworttheorie verschwindet.

Bisherige theoretische Arbeiten über nichtlineare Relaxation waren beschränkt auf das ferromagnetische Isingmodell mit Glauber spin-flip Dynamik [2,3] und auf das rein relaxierende Ginzburg-Landau Modell [4], welches in derselben Universalitätsklasse vermutet wird. Man vermutet, daß im Gegensatz zum dynamischen kritischen Exponenten die universellen Amplitudenverhältnisse für die nichtlineare Relaxation große Fluktuationskorrekturen in 3 Dimensionen besitzen. In der vorliegenden Arbeit diskutieren wir die nichtlineare kritische Relaxation eines etwas allgemeineren Modells (Gleichungen 2.14 a - 2.14 d), bei welchem der einkomponentige Ordnungsparameter an ein erhaltenes nichtordnendes Feld koppelt. Wir verwenden den Formalismus der Renormierungsgruppentheorie in $D = 4 - \epsilon$ Dimensionen mit $0 < \epsilon \ll 1$.

Die Fixpunktwerte und die Exponenten für dieses Modell sind bereits in [5] und [6] untersucht worden.

Da die Bedeutung dieses Modells für die Relaxation des Ordnungsparameters in einfachen binären Legierungen bisher noch nicht im Zusammenhang diskutiert wurde, betrachten wir dies im Abschnitt 2 etwas genauer und zeigen, daß das erhaltene Feld der Teilchenanzahl der einen Legierungskomponente entspricht.

Die Gesamtteilchenzahl der Konstituenten bleibt während der Temperaturvariation fest und die entsprechende Variation des konjugierten Feldes (in einer großkanonischen Beschreibung) ist singulär am kritischen Punkt und führt zu einer Fisher-Renormierung der statischen kritischen Exponenten. Dies wird explizit für unser Modell in Abschnitt 3 gezeigt unter Verwendung der Technik der minimalen Subtraktion [8].

In Abschnitt 4 wird das Skalenverhalten der nichtlinearen Relaxation mit den entsprechenden Renormierungsgruppengleichungen diskutiert. Analog zu [4] (Teil I) wird eine Bewegungsgleichung für den Ordnungsparameter hergeleitet. Die explizite Form dieser Bewegungsgleichung bis zur 1 Loop Ordnung wird in Abschnitt 5 angegeben und es werden verschiedene Spezialfälle diskutiert. Wir betrachten z.B. die Zeit-(t)-Abhängigkeit des Ordnungsparameters $M(t)$ mit dem Anfangsgleichgewichtswert $M = M_i$ entsprechend einer Temperatur unterhalb T_c (Punkt i_1 in Fig.1), nach einer plötzlichen Temperaturänderung zu $T_f \gtrsim T_c$ (mit einem Endgleichgewichtswert entsprechend Punkt f in Fig.1), für die der spontane Ordnungsparameter bei derselben Temperaturänderung unterhalb T_c , $M_{sp}(-\tau_f)$ mit $\tau_f \propto T_f - T_c$, viel kleiner als

M_i ist. Wir finden, daß sich $M(\underline{t})$ verhält wie

$$\begin{aligned} &= A_1 (2\underline{t} \tau_F^{v_F z})^{-\beta/vz} & M_i \gg M(\underline{t}) \gg M_{sp} \\ M(\underline{t})/M_{sp}(-\tau_f) & \quad \text{für} & (1.1) \\ &\propto \exp(-\underline{t} \tau_f^{v_F z}) & M_{sp} \gg M(t) \end{aligned}$$

Für einen Feldsprung anstelle eines Temperatursprungs (von i_2 nach f in Fig.1), finden wir wiederum das Verhalten (1.1), aber eine Amplitude A_2 für das Potenzgesetz.

Dieses Potenzgesetzverhalten ist analog zu dem Fall, bei dem die Kopplung an die erhaltene Dichte verschwindet [3,9], aber hier gilt das Skalengesetz $z = 2 + \alpha/v$ [5] und $v_F = v/(1 - \alpha)$ ist ein Fisher-renormierter Exponent. Die universellen Amplituden A_1 , A_2 , welche aus unserer Bewegungsgleichung berechnet werden, sind für den entkoppelten Fall ebenso verschieden.

2. Diskussion des Modells^{*}

Wir betrachten den einfachsten Fall einer binären Legierung mit einem bcc Gitter [10]. Beschränkt man sich auf den Fall nur nächster Nachbarwechselwirkung und liegen keine Leerstellen im Gitter vor, dann ist die mikroskopische Konfigurationswahrscheinlichkeit proportional zu

$$\begin{aligned} &\exp \left\{ - \mathcal{H}_K[s] / T + \mu \sum_i s_i \right\} \\ \mathcal{H}_K &= K \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad K > 0 \end{aligned} \quad (2.1)$$

^{*} Die folgenden Überlegungen sind entstanden in Diskussionen mit R. Bausch, K. Binder und H.K. Janssen.

wobei $s_i = \pm 1$ die Besetzung eines Gitterplatzes i mit einem der zwei Konstituenten bezeichnet, K die Ordnungsenergie angibt, und $\mu(\bar{c}, T)$ so gewählt ist, daß die mittlere Konzentrationsdifferenz $\bar{c}$ der Konstituenten, gegeben durch

$$\langle \sum_i s_i \rangle = \bar{c} \sum_i 1, \quad -1 < \bar{c} < 1 \quad (2.2)$$

konstant bleibt wenn die Temperatur T variiert. In einem bestimmten $\bar{c}$ Intervall um $\bar{c} = 0$ gibt es eine Linie von kritischen Punkten

$$T = T_c(\bar{c}) = T_c(0) - \Delta(\bar{c}) \quad (2.3)$$

mit Δ gerade und konvex von unterhalb. Diese Linie trennt den geordneten vom ungeordneten Zustand, wenn eins der beiden einfachen Untergitter von einem der beiden Konstituenten bevorzugt wird. Um die kritische Dynamik dieses Systems zu diskutieren, muß man die langsamen Moden identifizieren. Dies sind das Konzentrationsfeld

$$dx \cdot \vec{c}(x) = \sum_{i \in x} s_i \quad (2.4)$$

welches eine erhaltene Größe ist, und das Ordnungsparameterfeld

$$dx \cdot \vec{\sigma}(x) = \sum_{i \in x} \eta_i s_i. \quad (2.5)$$

Hier gilt $\eta_i = +1$ auf dem einen einfach-kubischen Untergitter und -1 auf dem anderen, und $i \in x$ bezeichnet Gitterpunkte in einem Volumenelement dx um den Punkt x . Aus Gründen, welche in Kapitel 5 von [4d] diskutiert werden, nehmen wir nicht die Energie als weiteren langsamen Mode hinzu.

Integriert man andere Freiheitsgrade aus, dann erhält man eine statische Konfigurationswahrscheinlichkeit

$$\exp \left\{ -\hat{\mathcal{H}} \left[\overset{\circ}{\sigma}, \overset{\circ}{c} \right] + \mu \int dx \overset{\circ}{c}(x) \right\} \quad (2.6)$$

mit

$$\langle \int dx \overset{\circ}{c}(x) \rangle = \bar{c} \int dx \quad (2.7)$$

nach (2.2). Der effektive Hamiltonian $\hat{\mathcal{H}}$ ist eine gerade Funktion

$$\hat{\mathcal{H}} \left[-\overset{\circ}{\sigma}, -\overset{\circ}{c} \right] = \hat{\mathcal{H}} \left[\overset{\circ}{\sigma}, \overset{\circ}{c} \right] \quad (2.8)$$

da $\mathcal{H}_K$ gerade ist. Für den lokalen Anteil $\hat{\mathcal{H}}_l(\overset{\circ}{\sigma}, \overset{\circ}{c})$ von $\hat{\mathcal{H}}$ führen mean-field Überlegungen für das betrachtete $T, \bar{c}$ Gebiet zu

$$\left(\frac{\partial^2 \hat{\mathcal{H}}_l}{\partial \overset{\circ}{c}^2} \right)_{\overset{\circ}{\sigma}=0, \overset{\circ}{c}=\bar{c}} \neq 0 \quad (2.9)$$

und

$$\left(\frac{\partial^2 \hat{\mathcal{H}}_l}{\partial \overset{\circ}{\sigma}^2} \right)_{\overset{\circ}{\sigma}=0, \overset{\circ}{c}=\bar{c}} = 0 \quad \text{für} \quad \tau_0 + \Delta_{mf}(\bar{c}) = 0 \quad (2.10)$$

wobei

$$\tau_0 \sim T - T_c^{mf}(\bar{c}=0), \quad \tau_0 + \Delta_{mf}(\bar{c}) \sim T - T_c^{mf}(\bar{c}) \quad (2.11)$$

weil es eine Ordnungsinstabilität, aber keine Konzentrationsinstabilität in der Hochtemperaturphase gibt. Damit erhält man für $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\hat{\mathcal{H}} = \int dx \left\{ \frac{1}{2} \left(\tau_0 + \Delta_{mf}(\bar{c}) \right) \overset{\circ}{\sigma}^2 + \frac{1}{2} \bar{c}^2 + \frac{1}{2} (\nabla \overset{\circ}{\sigma})^2 + U \overset{\circ}{\sigma}^4 + \dots \right\} \quad (2.12)$$

Drückt man $\overset{\circ}{c}(x)$ durch die Fluktuationen $\overset{\circ}{m}(x)$ aus:

$$\overset{\circ}{c}(x) = \bar{c} + \overset{\circ}{m}(x), \quad (2.13)$$

und nimmt man ein formales Feld $\overset{\circ}{h}_\sigma$ mit, welches an den Ordnungsparameter $\overset{\circ}{\sigma}$ koppelt, dann erhält man die Konfigurationswahrscheinlichkeit

$$\exp \left\{ -F \left[\overset{\circ}{\sigma}, \overset{\circ}{m} \right] \right\}, \quad F = \mathcal{K} - \int dx \left\{ \overset{\circ}{h}_\sigma \cdot \overset{\circ}{\sigma} + \overset{\circ}{h}_m \cdot \overset{\circ}{m} \right\} \quad (2.14a)$$

$$\mathcal{K} = \int dx \left\{ \frac{1}{2} \left[\overset{\circ}{\tau} \overset{\circ}{\sigma}^2 + (\nabla \overset{\circ}{\sigma})^2 + \overset{\circ}{m}^2 \right] + \overset{\circ}{U} \cdot \overset{\circ}{\sigma} + \overset{\circ}{A} \cdot \overset{\circ}{m} \cdot \overset{\circ}{\sigma}^2 \right\}$$

mit

$$\overset{\circ}{\tau} = \overset{\circ}{\tau}_0 + \Delta_{mf}(\bar{c}), \quad \overset{\circ}{A} = \frac{1}{2} \Delta'_{mf}(\bar{c}), \quad \overset{\circ}{h}_m = \mu - \bar{c}. \quad (2.15)$$

In F sind Terme der Art $\overset{\circ}{\sigma}^2 \cdot \overset{\circ}{m}^2$ usw. weggelassen, da solche Terme irrelevant sind bezüglich des Gaußschen Fixpunktes

$$F_G^x = \int dx \frac{1}{2} \left[(\nabla \overset{\circ}{\sigma})^2 + \overset{\circ}{m}^2 \right]. \quad (2.16)$$

Nach (2.13) muß $\overset{\circ}{h}_m$ so gewählt werden, daß

$$\int dx \langle \overset{\circ}{m}(x) \rangle = 0 \quad (2.14b)$$

wobei $\langle \rangle$ den Mittelwert mit der Verteilung (2.14a) bedeutet.

Da man keine reversiblen Mode-Kopplungsterme für die langsamen Moden (2.4), (2.5) erwartet, wird die kritische Dynamik durch Langevin Gleichungen (z.B. [11]) bestimmt

$$\partial_t \overset{\circ}{\sigma} = -\overset{\circ}{\lambda}_\sigma \cdot \delta F / \delta \overset{\circ}{\sigma} + \zeta_\sigma$$

$$\partial_t \overset{\circ}{m} = -\overset{\circ}{\lambda}_m (i\nabla)^2 \cdot \delta F / \delta \overset{\circ}{m} + \zeta_m \quad (2.14c)$$

Mit Gauß korrelierten Langevinkräften

$$\sim \exp \left\{ -\frac{1}{4} \int dt dx \left[\zeta_\sigma(xt) \cdot \overset{\circ}{\lambda}_\sigma^{-1} \cdot \zeta_\sigma(xt) + \right. \right.$$

$$\left. + \zeta_m(xt) \left(\overset{\circ}{\lambda}_m (i\nabla)^2 \right)^{-1} \cdot \zeta_m(xt) \right]. \quad (2.14d)$$

Wichtig ist, daß im symmetrischen Fall $\bar{c} = 0$ der Ordnungsparametermode von den Konzentrationsfluktuationen in (2.14a) entkoppelt ($\Delta'_{mf} = 0$ in 2.15) und die Dynamik dann durch das rein relaxierende Ginzburg-Landau Modell beschrieben wird [4].

3. Statisches Verhalten und Beziehung zum ϕ^4 - Modell

Da die Konzentrationsfluktuationen nur in zweiter Ordnung in F auftreten (2.14a), kann man die reduzierte statische Wahrscheinlichkeit $\exp[-F_{red} \{\overset{o}{\sigma}\}]$ durch Gauß Integration über $\overset{o}{m}$ erhalten [5,6], mit dem Resultat*

$$F_{red} = \int dx \left\{ \frac{1}{2} \left[\overset{o}{r} \overset{o}{\sigma}^2 + (\nabla \overset{o}{\sigma})^2 \right] + \overset{o}{u} \overset{o}{\sigma}^4 - \overset{o}{h}_{\sigma} \overset{o}{\sigma} \right\} \quad (3.1a)$$

$$\overset{o}{r} = \overset{o}{r} + 2 \overset{o}{A} \overset{o}{h}_m, \quad \overset{o}{u} = \overset{o}{u} - \frac{1}{2} \overset{o}{A}^2 \quad (3.1b,c)$$

d.h. ein ϕ^4 - Modell. Die Renormierung dieses Modells mit der minimalen Subtraktion

$$\overset{o}{u} = u \cdot \frac{\mu^{\epsilon}}{K_D} \cdot Z_u \cdot Z_{\sigma}^{-2}, \quad \overset{o}{\sigma} = \sigma \cdot \mu^{\frac{D-2}{2}} \cdot Z_{\sigma}^{1/2} \quad (3.2a,b)$$

$$\overset{o}{r} = r \cdot \mu^2 \cdot Z_r \cdot Z^{-1}, \quad \overset{o}{h}_{\sigma} = h_{\sigma} \cdot \mu^{\frac{D+2}{2}} \cdot Z_{\sigma}^{-1/2} \quad (3.2c,d)$$

ist wohlbekannt (s.z.B. [8b,c]). K_D ist die Oberfläche der D-dimensionalen Kugel dividiert durch $(2\pi)^D$, μ der übliche externe Längenparameter und wir benutzen dimensionslose renormierte Parameter.

* Unser Modell ist ein Spezialfall des bikritischen Modells in [12], und in den Abschnitten 3,4 benutzen wir eine Notation wie in [12b].

Für die Renormierung der vollen statischen Verteilung (2.14a) ist es üblich $\overset{\circ}{r}$ anstatt der Variablen $\overset{\circ}{h}_m$ zu verwenden (Anhang A). Dann muß man zusätzlich zu (3.2b-d)

$$\overset{\circ}{U} = U \cdot \frac{\mu^\epsilon}{K_D} \cdot Z_U \cdot Z_\sigma^{-2}, \quad \overset{\circ}{A} = A \cdot \sqrt{\frac{\mu^\epsilon}{K_D}} \cdot Z_A \cdot Z_\sigma^{-1} \cdot Z_m^{-1/2} \quad (3.3a,b)$$

$$\overset{\circ}{m} = m \cdot \mu^{\frac{D}{2}} \cdot Z_m^{1/2}, \quad \overset{\circ}{\tau} = \tau \cdot \mu^2 \cdot Z_\tau \cdot Z_\sigma^{-1} \quad (3.3c,d)$$

renormieren. Die $Z_{U,A,m,\tau}$ haben die Struktur :

$$Z = 1 + \frac{f_1(U, A)}{\epsilon} + \frac{f_2(U, A)}{\epsilon^2} + \dots \quad (3.4)$$

Entsprechende sind die $Z_{u,\sigma,r}$ definiert, woraus folgt :

$$u = U - \frac{1}{2} A^2 \quad (3.5)$$

und eine Beziehung zwischen $Z_{u,U,A,m}$ [12b] nach (3.1c). Zwei weitere wichtige Relationen zwischen den Z-Faktoren

$$Z_m = Z_A Z_r^{-1}, \quad Z_A = Z_\tau \quad (3.6a,b)$$

werden in Anhang A hergeleitet.

Zusätzlich zu den Z-Faktoren (3.2) der reduzierten Theorie gibt es nur einen weiteren Z-Faktor (etwa Z_A).

Die Unabhängigkeit der "nackten" unrenormierten Größen bezüglich solcher Variationen $d \ln \mu$, dU , dA , $d \ln r$, $d \ln \tau$, $d \ln h_\sigma$, welche die "nackten" Parameter $\overset{\circ}{U}$, $\overset{\circ}{A}$, $\overset{\circ}{r}$, $\overset{\circ}{\tau}$, $\overset{\circ}{h}_\sigma$ fest lassen, führen zu einer Renormierungsgruppengleichung (RGE) (z.B. [13,11]). Mit der Notation

$$\overset{\circ}{M}: = < \overset{\circ}{\sigma} > , \quad \overset{\circ}{N}: = < \overset{\circ}{m} > ; \quad M = < \sigma > , \quad N = < m > \quad (3.7)$$

erhält man mit (3.2b,d)

$$\left\{ \frac{1}{2} (D-2+\hat{\eta}) - \frac{1}{\hat{v}} \frac{\partial}{\partial \ln r} - \frac{1}{2} (D+2-\hat{\eta}) \frac{\partial}{\partial \ln h_{\sigma}} + \partial_{U,A} \right\} M = 0 \quad (3.8)$$

da $< \overset{\circ}{\sigma} >$ unabhängig von $\overset{\circ}{\tau}$ ist für festes $\overset{\circ}{r}$, und mit (3.3c) erhält man

$$\left\{ - \frac{d \ln N}{d \ln \mu} - \frac{1}{\hat{v}} \frac{\partial}{\partial \ln r} + \frac{d \ln \tau}{d \ln \mu} \frac{\partial}{\partial \ln \tau} - \frac{1}{2} (D+2-\hat{\eta}) \frac{\partial}{\partial \ln h_{\sigma}} + \partial_{U,A} \right\} N = 0 . \quad (3.9)$$

Dabei gehen die Größen

$$\hat{\eta}(u) \equiv \frac{d \ln Z_{\sigma}}{d \ln \mu} , \quad - \frac{1}{\hat{v}(u)} \equiv \frac{d \ln r}{d \ln \mu} \equiv - 2 - \frac{d \ln Z_r \cdot Z_{\sigma}^{-1}}{d \ln \mu} \quad (3.10a,b)$$

gegen die kritischen Exponenten η und $-\frac{1}{v}$ der ϕ^4 - Theorie an deren kritischen Punkt $u = u^*$, und es gilt

$$\partial_{U,A} \equiv \frac{dU}{d \ln \mu} \frac{\partial}{\partial U} + \frac{dA}{d \ln \mu} \frac{\partial}{\partial A} \equiv \beta_U \frac{\partial}{\partial U} + \beta_A \frac{\partial}{\partial A} \quad (3.11)$$

Die beiden übrigen Koeffizienten in (3.9) kann man schreiben als

$$\frac{d \ln N}{d \ln \mu} + \frac{D}{2} \equiv - \frac{1}{2} \frac{d \ln Z_m}{d \ln \mu} = \frac{\epsilon}{2} + \frac{d \ln Z_r \cdot Z_{\sigma}^{-1}}{d \ln \mu} + \frac{d \ln A}{d \ln \mu} \quad (3.12)$$

nach (3.3b), (3.6a)^(*) und

(*) Gleichung (3.12) wurde auch in [12a] hergeleitet (Gleichung (4)).

$$\frac{d \ln \tau}{d \ln \mu} + 2 \equiv - \frac{d \ln Z_{\tau} Z_{\sigma}^{-1}}{d \ln \mu} = \epsilon + \frac{d \ln Z_r Z_{\sigma}^{-1}}{d \ln \mu} + 2 \frac{d \ln A}{d \ln \mu} \quad (3.13)$$

mit (3.6b). Die Nullstellen von $\beta_{U,A}$ bestimmen die Fixpunkte U^* , A^* des Modells. Explizite Ausdrücke für $Z_{A,U}$ aus denen man $\beta_{A,U}$ berechnen kann sind in [12b] angegeben oder durch (5.11) dieser Arbeit.

Nach (3.5) ist $U^* - \frac{1}{2} A^{*2}$ am Nicht-Gaußschen Fixpunkt mit kleinen Werten U^* , A^* gleich u^* , dem einzigen entsprechenden Fixpunkt der ϕ^4 -Theorie. Am stabilen Fixpunkt, der in niedrigster Ordnung in ϵ gegeben ist durch

$$U^* = \frac{\epsilon}{9}, \quad A^{*2} = \frac{\epsilon}{6} \quad (3.14)$$

führen die Gleichungen (3.12), (3.13) zusammen mit (3.10b) und bekannten Skalengesetzen der ϕ^4 -Theorie zu :

$$(d \ln \tau / d \ln \mu)^* = (d \ln N / d \ln \mu)^* = (\alpha - 1)/\nu \quad (3.15)$$

Damit sind die Lösungen von (3.8), (3.9) an diesem Fixpunkt

$$M(r, h_{\sigma}) = |r|^{\beta} \cdot f_1(h_{\sigma}/|r|^{\beta \cdot \delta}) \quad (3.16)$$

$$N(\tau, r, h_{\sigma}) = \tau \cdot f_2\left(r/|\tau|^{\frac{1}{1-\alpha}}, h_{\sigma}/|\tau|^{\beta_F \delta}\right) \quad (3.17)$$

wobei

$$\beta_F \equiv \beta/(1 - \alpha) . \quad (3.17a)$$

Löst man schließlich (3.17) nach r auf :

$$r(\tau, N, h_{\sigma}) = |\tau|^{\frac{1}{1-\alpha}} \cdot f_3\left(N/\tau, h_{\sigma}/\tau^{\beta_F \delta}\right) \quad (3.18)$$

und setzt das Resultat in (3.16) ein, so erhält man :

$$M(\tau, N, h_\sigma) = |\tau|^{\beta_F} \cdot f_4\left(N/\tau, h_\sigma/\tau^{\beta_F \delta}\right) \quad (3.19)$$

Für den Fall $N = 0$ sind die Variablen τ, r, h_σ auf eine Oberfläche beschränkt, gegeben durch (3.17) oder (3.18), welche die Linie der kritischen Punkte $r = h_\sigma = 0$ bei $\tau = 0$ schneidet und dort singular ist. Deshalb ist (3.19) eine Zustandsgleichung für $M(\tau, 0, h_\sigma)$ mit einem kritischen Punkt bei $\tau = h_\sigma = 0$ und Fisher-renormierten Exponenten.

4. Die renormierte Dynamik der Nichtlinearen Relaxation

Um die renormierte Dynamik zu formulieren ist es üblich [11,14] das Funktional [15]

$$W\{\overset{\circ}{H}\} = \ln \int \delta\{\overset{\circ}{S}\} \exp\left[\int \{\overset{\circ}{S}\} + \int dx dt \overset{\circ}{H} \overset{\circ}{S}\right] \quad (4.1)$$

zu benutzen, mit

$$\overset{\circ}{S} = (\overset{\circ}{\sigma}, \overset{\circ}{\sigma}, \overset{\circ}{m}, \overset{\circ}{m}), \quad \overset{\circ}{H} = (\overset{\circ}{H}_\sigma, \overset{\circ}{H}_\sigma, \overset{\circ}{H}_m, \overset{\circ}{H}_m), \quad (4.2)$$

$$\delta\{\overset{\circ}{S}\} = \delta\{\overset{\circ}{i\sigma}, \overset{\circ}{\sigma}, \overset{\circ}{im}, \overset{\circ}{m}\}$$

und

$$\int \{\overset{\circ}{S}\} = \int dt dx \left\{ \overset{\circ}{\sigma} \left[\overset{\circ}{\lambda}_\sigma \overset{\circ}{\sigma} - \partial_t \overset{\circ}{\sigma} - \overset{\circ}{\lambda}_\sigma \frac{\delta \mathcal{K}}{\delta \sigma} \right] + \overset{\circ}{m} \left[\overset{\circ}{\lambda}_m (i\nabla)^2 \overset{\circ}{m} - \partial_t \overset{\circ}{m} - \overset{\circ}{\lambda}_m (i\nabla)^2 \frac{\delta \mathcal{K}}{\delta m} \right] \right\} \quad (4.3)$$

Die Felder $\overset{\circ}{H}(x, t \{< \overset{\circ}{S} > \})$, welche man braucht um die Mittel-

werte

$$\langle \overset{\circ}{S}(xt) \rangle \equiv \frac{\delta W}{\delta \overset{\circ}{H}(xt)} \quad (4.4)$$

zu erzeugen, werden durch die Legendre Transformierte

$$\Gamma\{\langle \overset{\circ}{S} \rangle\} = -\ln \int \delta\{\overset{\circ}{S}\} \exp\left[\int \overset{\circ}{H}(\overset{\circ}{S} - \langle \overset{\circ}{S} \rangle) dx dt \right] \quad (4.5)$$

von W bestimmt. Es gilt (vgl. die Herleitung von (A2))

$$\overset{\circ}{H}_\sigma(x, t, \{\langle \overset{\circ}{S} \rangle\}) = \frac{\delta \Gamma}{\delta \langle \overset{\circ}{S} \rangle(xt)} = - \left\langle \frac{\delta \overset{\circ}{J}}{\delta \overset{\circ}{S}(xt)} \right\rangle. \quad (4.6)$$

Um nun die physikalische Langevin-Dynamik (2.14) zu erhalten, mit zeitabhängigem, aber räumlich homogenen Feld $\overset{\circ}{h}$ und Temperatur $\overset{\circ}{T}$, muß man, wie ein Vergleich von (4.1), (4.3) mit (2.14a) zeigt, folgendes in (4.6) erfüllen :

$$\langle \overset{\circ}{\sigma} \rangle = \langle \overset{\circ}{m} \rangle = 0, \quad \overset{\circ}{H}_\sigma = \overset{\circ}{\lambda}_\sigma \overset{\circ}{h}_\sigma, \quad \partial_t \langle \overset{\circ}{m} \rangle = 0 \quad (4.7a-c)$$

Die Bedingung (4.7a) garantiert $\overset{\circ}{H}_\sigma = \overset{\circ}{H}_m = 0$ (vgl. Appendix C von [11]). Damit kommt man zu einer Bewegungsgleichung [4] der Form

$$\overset{\circ}{h}_\sigma(t; \overset{\circ}{U}, \overset{\circ}{A}, \overset{\circ}{J}; \{\overset{\circ}{T}\}, \{\overset{\circ}{M}\}, \overset{\circ}{N}, \overset{\circ}{\lambda}_\sigma) = - \overset{\circ}{\lambda}_\sigma^{-1} \left(\left\langle \frac{\delta \overset{\circ}{J}}{\delta \overset{\circ}{S}(xt)} \right\rangle \right) \quad (4.8)$$

$\langle \overset{\circ}{\sigma} \rangle = \langle \overset{\circ}{m} \rangle = \partial_t \langle \overset{\circ}{m} \rangle = 0$

mit der Notation (3.7) und (4.11). Der Zusammenhang mit der ersten Gleichung (2.14c) ist klar. Um die Dynamik zu renormieren führt man die Größen

$$\overset{\circ}{\sigma} = \tilde{\sigma} \cdot \mu^{\frac{D+2}{2}} \cdot \tilde{Z}_\sigma^{-1/2}, \quad \overset{\circ}{\lambda}_\sigma = \lambda_\sigma \cdot \mu^{-2} \cdot Z_{\lambda_\sigma} (\tilde{Z}_\sigma Z_\sigma)^{-1/2} \quad (4.9a,b)$$

$$\tilde{m}^0 = \tilde{m} \cdot \mu^{\frac{D}{2}} \cdot \tilde{Z}_m^{1/2}, \quad \tilde{\lambda}_m^0 = \lambda_m \cdot \mu^{-2} \cdot Z_{\lambda_m} (\tilde{Z}_m Z_m)^{-1/2} \quad (4.9c,d)$$

ein, wobei die kinetischen Koeffizienten $\lambda_{\sigma,m}$ die Dimension einer inversen Zeit haben.

Im Schema der minimalen Subtraktion werden die statischen Renormierungen (3.2), (3.3) in der Dynamik nicht modifiziert [14]. Fluktuations- Dissipationstheoreme und die Zeiterhaltung von $\int dx \tilde{m}^0(x)$ führen zu

$$Z_{\lambda_\sigma} = Z_\sigma, \quad Z_{\lambda_m} = Z_m, \quad \tilde{Z}_m Z_m = 1 \quad (4.10a-c)$$

(vgl. (8.20) und (8.17) in [11]). $\tilde{Z}_\sigma$ ist der einzige neue Z-Faktor in der Dynamik und hängt von den dimensionslosen renormierten Variablen U, A, ρ ab. Hier und in (4.8) wurde dabei eingeführt

$$\tilde{\rho}^0 = \tilde{\lambda}_\sigma^0 / \lambda_m, \quad \tilde{\rho} = \lambda_\sigma / \lambda_m. \quad (4.11)$$

Die RGE für das renormierte Funktional h_σ definiert über h_σ aus (4.8) mit

$$h_\sigma^0 = h_\sigma(t; U, A, \rho; \{\tau\}, \{M\}, N, \lambda_\sigma) \cdot \mu^{\frac{D+2}{2}} \cdot Z_\sigma^{-1/2} \quad (4.12)$$

(vgl. (3.2d)) wird in der üblichen Weise hergeleitet (z.B. Kapitel 3 von [4a]) mit dem Resultat

$$\left\{ \frac{1}{2} (D+2-\hat{n}) + \frac{d \ln N}{d \ln \mu} \frac{\partial}{\partial \ln N} + \int dt' \left[\frac{d \ln \tau}{d \ln \mu} \frac{\delta}{\delta \ln \tau(t')} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{2} (D-2+\hat{n}) \frac{\delta}{\delta \ln M(t')} \right] + \frac{d \ln \lambda_m}{d \ln \mu} + \frac{d \ln \rho}{d \ln \mu} \frac{\partial}{\partial \ln \lambda_\sigma} \right. \\ \left. + \partial_{U,A,\rho} \right\} h_\sigma = 0. \quad (4.13)$$

Hierbei ist $\partial_{U,A,\rho}$ eine Verallgemeinerung von (3.11) mit der Funktion $\beta_\rho(U, A, \rho)$, welche für $U = \bar{U}^*$, $A = \bar{A}^*$ (3.14) den stabilen Fixpunktwert

$$\rho^* = 1 + 0(\epsilon) \quad (4.14)$$

von ρ bestimmt (5.19). Am dynamischen Fixpunkt (3.14), (4.14) verschwindet $(d \ln \rho / d \ln \mu)^*$, und man erhält unter Verwendung von (4.9d), (4.10b), (3.12) und (3.10b)

$$(d \ln \lambda_m / d \ln \mu)^* = 2 - (d \ln Z_m / d \ln \mu)^* = 2 + \alpha/\nu \equiv Z. \quad (4.15)$$

Damit ist die Lösung von (4.13)

$$h_\sigma^* (t; \{L\tau\}, \{L^{\beta_F} M\}, LN, L^{-\nu_F Z} \lambda_\sigma) = L^{\beta_F \delta^*} h_\sigma (t; \{\tau\}, \{M\}, N, \lambda_\sigma) \quad (4.16)$$

wobei L eine beliebige Konstante ist und $\nu_F = \nu/(1-\alpha)$ wie in (3.17a). Führt man Funktionen $\hat{\tau}$, $\hat{M}$, $\hat{h}_\sigma$ mit dem dimensionslosen Zeitargument $\hat{t}$ ein :

$$\tau(t) = \tau(\hat{t}/\lambda_\sigma) = \hat{\tau}(\hat{t}) \quad \text{etc.} \quad (4.17)$$

dann können die Größen λ_σ oder $L^{-\nu_F Z} \cdot \lambda_\sigma$ in der Bewegungsgleichung (4.16) völlig in die Argumente von $\hat{\tau}$, $\hat{M}$, $\hat{h}_\sigma$ gezogen werden. Das heißt,

$$L \hat{\tau} (L^{\nu_F Z} \hat{t}), L^{\beta_F} \hat{M} (L^{\nu_F Z} \hat{t}), LN, L^{\beta_F \delta} \cdot \hat{h}_\sigma (L^{\nu_F Z} \hat{t}) \quad (4.18)$$

ist eine Lösung des dynamischen Problems (am Fixpunkt) für alle Konstanten L , wenn es eine Lösung für $L = 1$ ist. Man kann dies auch in der Form schreiben (wobei das Symbol $\wedge$ wieder weggelassen wird) :

$$M \left(t, \{ \tau(t) \}, \{ h_{\sigma}(t) \}, N \right) = L^{\beta_F} M \left(L^{\nu_F Z} t, \left\{ \tau \left(L^{-\nu_F Z} t \right) / L \right\}, \left\{ h_{\sigma} \left(L^{-\nu_F Z} t \right) / L^{\beta_F \delta} \right\}, N / L \right) \quad (4.19)$$

wobei (4.19) für den zeitunabhängigen Fall mit $L = \tau$ wieder (3.19) ergibt. Für Relaxationsprozesse mit $\tau(t)$, $h_{\sigma}(t)$ gleich Konstanten τ_i , h_i oder τ_f , h_f für $t < 0$ bzw. $t > 0$, ergibt sich aus (4.19) mit $L^{\nu_F Z} t = 1/2$ und $h_f = N = 0$

$$\underline{M}(\underline{t}, \tau_i, \tau_f, \underline{h}_i) = (2\underline{t})^{-\beta/\nu_Z} \underline{M} \left(\frac{1}{2}, \tau_i (2\underline{t})^{1/\nu_F Z}, \tau_f (2\underline{t})^{1/\nu_F Z}, \underline{h}_i (2\underline{t})^{\beta\delta/\nu_Z} \right) \quad (4.20)$$

für $\underline{t} > 0$. Dabei haben wir neue Variablen $\underline{M} \sim M$, $\underline{h}_i \sim h_i$ und $\underline{t} \sim t$ eingeführt über die Bestimmungsgleichungen

$$\underline{M}(\infty, \tau_i, -|\tau|, \underline{h}_i) = |\tau|^{\beta_F} \quad (4.21a)$$

$$M(\underline{t}, \tau_i, |\tau|, \underline{h}_i) \propto \exp \left\{ -\underline{t} |\tau|^{\nu_F Z} \right\} \text{ für } \underline{t} \rightarrow \infty \quad (4.21b)$$

$$\underline{M}(0, 0, \tau_f, \underline{h}_i) = \underline{h}_i^{1/\delta} \quad (4.21c)$$

Für einen reinen Feldsprung (bezeichnet mit $\zeta = 2$)

$$|\underline{h}_i|^{1/\delta} \gg |\tau|^{\beta_F}, \quad \tau_i = \tau_f = \tau \quad (4.22)$$

oder einen reinen Temperatursprung ($\zeta = 1$)

$$\tau_i \gg |\tau_f|, \quad \underline{h}_i = 0 \quad (4.23)$$

in einen Bereich, der im Gleichgewicht nahe dem kritischen Punkt ist, erwartet man für Zeiten

$$|\underline{h}_i|^{1/\delta} \gg \underline{t}^{-\beta/\nu_Z} \gg |\tau|^{\beta_F} \quad (4.22a)$$

oder

$$(-\tau_i)^{\beta} \gg \underline{t}^{-\beta/\nu z} \gg |\tau_f|^{\beta_F} \quad (4.23a)$$

daß der Faktor von $(2\underline{t})^{-\beta/\nu z}$ auf der rechten Seite von (4.20) keine Infrarotsingularitäten enthält, da er einen (dynamischen) Zustand weit weg vom kritischen Punkt beschreibt. Deshalb kann man diesen Faktor um den entsprechenden Ausdruck der mean-field Theorie entwickeln, (nächster Abschnitt) und zeigen, daß es sich um eine endliche Konstante A_z handelt, d.h. um die Amplitude eines Potenzgesetzes $(2\underline{t})^{-\beta/\nu z}$ für die linke Seite von (4.20). Hier und in (4.20) ist ein Faktor 2 in das Potenzgesetz multipliziert worden, da wir A in der mean-field Theorie ($\epsilon = 0$) auf 1 normieren wollen. Anders als beim Potenzgesetzexponenten können sich die Amplituden A_z für $z = 1,2$ unterscheiden. A_z kann am einfachsten erhalten werden, indem man bei realen oder Computerexperimenten die Relaxationswerte von $M(t)$ für $\tau_f > 0$ und $M_i \gg M_{\text{spontan}}(-\tau_f)$ (äquivalent zu (4.22, 4.23)), ausgedrückt durch $M(t) / M_{\text{spontan}}(-\tau_f)$, plottet. $M(t) / M_{\text{spontan}}(-\tau_f)$ verhält sich dabei nach (4.21a,b), (4.20) wie in (1.1) angegeben. Als Zeiteinheit verwendet man das Exponentialverhalten für große Zeiten. Im nächsten Abschnitt wird die Amplitude A berechnet für den Spezialfall $\tau_f = 0$ in (4.20).

5. Entwicklung um die Landau-Van Hove Theorie bis zur 1 Loop- Ordnung

Ausgedrückt durch die renormierten Größen (3.2), (3.3), (4.9) lautet die Bewegungsgleichung (4.8) in erster Ordnung in U , $A\sqrt{U}$ für $N = 0$

$$h_{\sigma} = \tilde{Z}_{\sigma}^{1/2} \partial_t \mathcal{M} + \tau Z_{\tau} \mathcal{M} + Z_U \mathcal{M}^3 + \frac{1}{K_D} \int_{Q, Q'} [12 U \mathcal{M} \langle s_Q s_{Q'} \rangle + 4 A \sqrt{U} \langle s_Q s_{Q'} \rangle] \quad (5.1)$$

wobei wir Fluktuationen von σ eingeführt haben durch

$$\sigma(xt) = M(t) + \int_Q e^{iQ\mu x} s_Q(t), \quad \int_Q \equiv \int \frac{d^D Q}{(2\pi)^D} \quad (5.2)$$

mit einem dimensionslosen Wellenvektor Q . Weiterhin haben wir eingeführt

$$m(x) = \int_Q e^{iQ\mu x} m_Q(t) \quad (5.3)$$

und die Größen

$$\mathcal{M}(t) = M(t) \sqrt{\frac{4U}{K_D}}, \quad h_{\sigma}(t) = h_{\sigma}(t) \sqrt{\frac{4U}{K_D}} \quad (5.4)$$

die von der Größenordnung $O(1)$ sind. $Z_{\sigma} = 1$ in der betrachteten Ordnung. Die Korrelationsfunktionen in (5.1)

$$\langle s_Q(t) s_{Q'}(t) \rangle = \alpha_Q(t) \Delta(Q + Q'), \quad (5.5)$$

$$\langle s_Q m_{Q'} \rangle = \beta_Q \Delta(Q + Q'), \quad \langle s_Q s_{Q'} \rangle = \gamma_Q \Delta(Q + Q')$$

mit

$$\Delta(Q) = (2\pi)^D \delta^{(D)}(Q) \quad (5.6)$$

werden nur in 0-Loop-Ordnung benötigt. Die entsprechenden Gleichungen kann man erhalten, indem man entweder den quadratischen Anteil in $\tilde{\sigma}$, s , $\tilde{m}$, m des Funktionalintegrals für $\langle \rangle$ nimmt, (4.1-4.4, 4.7), oder indem man direkt von den Langevin Gleichungen (1.14) ausgeht, welche man in $\overset{0}{s}$, $\overset{0}{m}$ linearisiert und mit ($q = uQ$)

$$\begin{aligned} \langle \overset{0}{s}_q(t) \zeta_{q'}^{(\sigma)}(t) \rangle &= \lambda_{\sigma}^0 \Delta(q+q') , \\ \langle \overset{0}{m}_q \zeta_{q'}^{(m)} \rangle &= \lambda_m^0 q^2 \Delta(q+q') \quad (5.7) \\ \langle \overset{0}{s}_q(t) \zeta_{q'}^{(m)}(t) \rangle &= \langle \overset{0}{m}_q \zeta_{q'}^{(\sigma)} \rangle = 0 \end{aligned}$$

dann schließlich findet ($K \equiv A / \sqrt{U}$) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \alpha_Q + \alpha_Q \cdot [\tau + 3 \mathcal{M}_0^2 + Q^2] + \beta_Q \cdot K \cdot \mathcal{M}_0 &= 1 \\ \frac{d}{dt} \beta_Q + \alpha_Q \cdot \frac{Q^2}{\rho} K \mathcal{M}_0 + \beta_Q \cdot [\tau + 3 \mathcal{M}_0^2 + Q^2 (1 + \frac{1}{\rho})] + \gamma_Q K \mathcal{M}_0 &= 0 \quad (5.8) \\ \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \gamma_Q + \beta_Q \cdot \frac{Q^2}{\rho} K \mathcal{M}_0 + \gamma_Q \cdot \frac{Q^2}{\rho} &= \frac{Q^2}{\rho} \end{aligned}$$

Der Index 0 bedeutet, daß es sich um die 0-Loop Approximation handelt, d.h. 0. Ordnung in U , A^2 für $\mathcal{M}(t)$.

Setzt man die Lösung von (5.8) in (5.1) ein, dann erhält man eine nichtlineare Bewegungsgleichung mit Memory Termen (vgl. [4] für den Fall $K = 0$). Für $K \neq 0$ haben wir keine allgemeine analytische Lösung von (5.8) gefunden, und beschränken uns deshalb auf die Diskussion von Spezialfällen. Die Fälle (a), (b) dienen zur Identifizierung der Einheiten (4.21a,b) für $\underline{M}$ und $\underline{t}$, und

in (c) berechnen wir die Amplitude $\underline{A}$ (1.1, 4.20) des nichtlinearen Potenzgesetzes.

(a) Der zeitunabhängige Fall (Zustandsgleichung)

Wenn $\mathcal{M}_0$ zeitunabhängig ist, erhält man als Lösung von (5.8)

$$\alpha_Q = [T + Q^2]^{-1}, \quad T \equiv \tau + (3 - K^2) \mathcal{M}_0^2 \quad (5.9)$$

$$\beta_Q = -K \mathcal{M}_0 \alpha_Q, \quad \gamma_Q = (\tau + 3 \mathcal{M}_0^2 + Q^2) \alpha_Q.$$

Setzt man dies in (5.1) ein, dann erhält man

$$h_\sigma = \tau Z_\tau \mathcal{M} + Z_U \mathcal{M}^3 - \frac{1}{\epsilon} (12U - 4A^2) \mathcal{M}_0 T^{1-\epsilon/2} \quad (5.10)$$

wobei wir Terme der Ordnung $(U, A^2) \cdot \epsilon$ weggelassen haben. Das Verschwinden der ϵ -Polterme in (5.10) in jeder Ordnung in U, A^2 definiert die Z-Faktoren (vgl. (3.6b))

$$Z_U = 1 + \frac{(12U - 4A^2)(3 - K^2)}{\epsilon}, \quad Z_A \equiv Z_\tau = 1 + \frac{12U - 4A^2}{\epsilon} \quad (5.11)$$

bis $O(U, A^2)$, aus denen man die Fixpunktwerte (3.14) erhält.

Für den 1-Loop-Beitrag $(O(U, A^2)) \mathcal{M}_1$ zu $\mathcal{M} (\mathcal{M} = \mathcal{M}_0 + \mathcal{M}_1 + \dots)$ folgt aus (5.10) :

$$\mathcal{M}_1 = - (6U - 2A^2) \cdot \frac{T \ln T}{\tau + 3 \mathcal{M}_0^2} + O((U, A^2) \cdot \epsilon) \quad (5.12)$$

$\mathcal{M}_0 + \mathcal{M}_1$ ist am Fixpunkt (3.14) konsistent mit der Skalenrelation (4.19) in erster Ordnung in ϵ . Für $L = \tau$ in (4.19) erhält man die spontane Magnetisierung

$$\mathcal{M}_{sp}(-|\tau|) = a \cdot |\tau|^{\beta_F}, \quad a = 1 + \varepsilon \cdot (\ln 2) / 12 \quad (5.13)$$

und aus (4.21a) erhält man die normierte Magnetisierung $\underline{M}$ als

$$\underline{M} = \mathcal{M} / a. \quad (5.14)$$

(b) Lineare Relaxation für $\tau_f > 0$

Wir benötigen dazu in (5.1) $\beta_Q(t)$ in erster Ordnung in der Abweichung vom Endgleichgewicht, gegeben durch

$$\mathcal{M}_0 = 0, \quad \alpha_Q = [\tau_f + Q^2]^{-1}, \quad \beta_Q = 0, \quad \gamma_Q = 1 \quad (5.15)$$

in 0-Loop-Ordnung. Aus (5.8) erhalten wir

$$\beta_Q(t) = \beta_Q(0) e^{-Rt} - \frac{KR}{\tau + Q^2} \int_0^t dt' \mathcal{M}_0(t') e^{R(t'-t)} \quad (5.16)$$

$$R \equiv \tau_f + P, \quad P = Q^2 (1 + 1/\rho).$$

Dies kann mit $\mathcal{M}_0(t') = \mathcal{M}(0) \exp(-t'\tau_f)$ geschrieben werden als

$$\beta_Q(t) = \mathcal{M}_0(t) \left[\left(\beta_Q(0) / \mathcal{M}(0) \right) \cdot e^{-Pt} - \frac{KR/P}{\tau_f + Q^2} (1 - e^{-Pt}) \right] \quad (5.17)$$

Der Term $\sim \exp(-Pt)$ gibt eine Korrektur $\sim t^{(2-D)/2} \cdot e^{-t\tau_f}$ in (5.1), welche aber für große Zeiten gegenüber dem dominierenden Verhalten $\sim e^{-t\tau_f}$ vernachlässigt werden kann. An dieser Stelle betonen wir noch einmal, daß anders als im Fall mit $K = 0$ die Bewegungsgleichung (5.1) linearisiert um $h_\sigma = 0$, $\tau > 0$ auch schon in 1-Loop-Ordnung Memory-Terme enthält wegen der Funktion $\beta_Q(t, \{\mathcal{M}_0(t')\})$.

Mit (5.17) erhält man dann aus (5.1) für das asymptotische Langzeitverhalten

$$0 = \tilde{Z}_{\sigma}^{1/2} \partial_t \mathcal{M} + \tau_f Z_{\tau} \mathcal{M} - \left(12U - 4A^2 + \frac{4A^2}{1+1/\rho} \right) \cdot \frac{\tau_f^{1-\varepsilon/2}}{\varepsilon} \mathcal{M}_0 \quad (5.18)$$

Aus der Forderung, daß die Polterme sich wegheben, erhält man

$$\tilde{Z}_{\sigma} = 1 - \frac{1}{\varepsilon} \frac{8A^2}{1 + 1/\rho} \quad (5.19)$$

woraus man den Fixpunktwert (4.14) erhält unter Verwendung der Beziehungen (4.9), (4.10) und (4.11). Das Langzeitverhalten ist damit :

$$0 = (\partial_t + \tau_f)(\mathcal{M}_0 + \mathcal{M}_1) + \left(6U - \frac{2A^2}{1+\rho} \right) \tau_f \ln \tau_f \cdot \mathcal{M}_0 \quad (5.20)$$

Verwendet man nun (4.19) mit $L = \tau_f$ am Fixpunkt (3.14), (4.14), dann erhält man das Langzeitverhalten der Relaxation

$$\mathcal{M} \sim \exp(-t \tau_f^{v_F^Z}) \quad \text{bzw.}$$

$$\underline{t} = t \quad (5.21)$$

als Zeiteinheit nach (4.21b) in 1-Loop-Ordnung.

(c) Das Nichtlineare Potenzgesetz

Wegen der Beziehung (4.20) betrachten wir nun den Limes $\tau_f \rightarrow 0$, $\mathcal{M}(0) \rightarrow \infty$. Außerdem führen wir neue Variablen ein

$$y = 2 \cdot t \cdot Q^2, \quad \alpha = Q^{-2} \cdot \hat{\alpha}, \quad \beta = \frac{\mathcal{M}}{K} \cdot Q^{-2} \cdot \hat{\beta}, \quad \gamma = \hat{\gamma} \quad (5.22)$$

mit der Abkürzung

$$K \equiv A / \sqrt{U}. \quad (5.23)$$

Damit nehmen die Gleichungen (5.8) für die Fluktuationen folgende Form an

$$\begin{pmatrix} \partial_y + 3/y + 1 & , & 1/y & , & 0 \\ K^2/\rho & , & \partial_y + 1/y + \frac{1+1/\rho}{2} & , & K^2/2 \\ 0 & , & 1/(y\rho) & , & \partial_y + 1/\rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \\ \hat{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1/\rho \end{pmatrix} \quad (5.24)$$

mit

$$\mathcal{M}_0^2(t) = 1/(2t) = Q^2/y . \quad (5.25)$$

Aus (5.9) folgt für die Anfangsbedingungen

$$\hat{\alpha} = \hat{\beta} = 0 ; \quad \hat{\gamma} = \frac{n_\zeta}{n_\zeta - K^2} , \quad n_1 = 2 , \quad n_2 = 3 \quad (5.26)$$

für $t = y = 0$. Nach (4.22), (4.23) entspricht $\zeta = 1,2$ entweder einem reinen Temperatursprung aus der geordneten Phase, oder einem reinen Feldsprung zu $\tau_f = h_\sigma = 0$. Nach (5.24), (5.25) hängen die Funktionen $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$, $\hat{\gamma}$ von den Variablen Q^2 , t nur in der Kombination y ab, und man kann den letzten Term in (5.1) schreiben :

$$12U \mathcal{M}_0 \int_0^\infty dQ Q^{D-3} (\hat{\alpha} + \hat{\beta}/3) = 6U \cdot (2t)^{\frac{1-D}{2}} \cdot \int_0^\infty dy y^{-\epsilon/2} \cdot (\hat{\alpha} + \hat{\beta}/3) \quad (5.27)$$

Um die Polterme von (5.27) herauszuziehen betrachten wir die Lösung von (5.24) für große y

$$\hat{\alpha} \rightarrow a_0 + a_1 / y , \quad \hat{\beta} \rightarrow b_0 + b_1 / y \quad (5.28)$$

$$a_0 = 1 , \quad b_0 = -K^2 ; \quad a_1 = -3 + K^2 , \quad b_1 = K^2 \cdot \left(3 - \frac{1}{1+1/\rho} - K^2 \right)$$

und schreiben (*) das Integral $I_{\rho,K}(\epsilon)$ auf der rechten Seite von (5.27) in der Form :

$$I_{\rho,K}(\epsilon) = \int_0^1 dy y^{-\epsilon/2} \cdot [\hat{\alpha} - a_0 + (\hat{\beta} - b_0) / 3] \\ + \int_1^\infty dy y^{-\epsilon/2} \cdot [\hat{\alpha} - a_0 - a_1 / y + (\hat{\beta} - b_0 - b_1 / y) / 3] \quad (5.29) \\ + \frac{2}{\epsilon} (a_1 + b_1 / 3) \equiv \bar{I}_{\rho,K}(\epsilon) + \frac{2}{\epsilon} (a_1 + b_1 / 3)$$

Dabei ist die Größe $\bar{I}$ regulär für $\epsilon \rightarrow 0$. Setzt man (5.27) und (5.29) in (5.1) ein, dann heben sich die Polterme weg, und man erhält, abgesehen von Beiträgen $O(U \cdot \epsilon)$

$$0 = \partial_t (\mathcal{M}_0 + \mathcal{M}_1) + \mathcal{M}_0^3 + 3 \mathcal{M}_0^2 \cdot \mathcal{M}_1 + 6U \cdot (2t)^{-3/2} \\ \times [\bar{I}_{\rho,K}(0) + (a_1 + b_1 / 3) \cdot \ln(2t)] \quad (5.30)$$

Am Fixpunkt (3.14), (4.14) folgt daraus für

$$\mathcal{M}(t) = a \cdot \mathcal{A} \cdot (2t)^{-\beta/\nu z} \quad (5.31)$$

((1.1), (5.14), (5.21)) das Resultat

$$\mathcal{A} = 1 - \epsilon [\bar{I}^*(0) + 1 + (\ln 2) / 4] / 3 \quad (5.32)$$

unter Verwendung von (4.20).

(*) Die Terme a_0, b_0 in (5.29) kommen aus der T_c Verschiebung, und sind formal in der Dimensionsregularisierung nicht vorhanden.

Um $\bar{I}^*(0)$ zu erhalten, lösten wir die Gleichungen (5.24) numerisch am Fixpunkt mit den Anfangsbedingungen (5.26) und berechneten anschließend die Integrale in (5.29) numerisch. Für die Potenzgesetzamplituden finden wir für die Fälle $\zeta = 1, 2$:

$$A_1 = 1 - 0.48 \epsilon \quad (5.33)$$

$$A_2 = 1 - 0.54 \epsilon$$

Diese Amplituden unterscheiden sich von den entsprechenden Größen [4d]

$$A_1^{(A=0)} = A_2^{(A=0)} = 1 - 0.36 \epsilon \quad (5.34)$$

für den Fall, daß die Kopplung K an die erhaltene Dichte verschwindet^(*). A entspricht dabei der Wurzel der in [4d] definierten Amplitude.

6. Diskussion

Unsere Resultate (5.33) für die nichtlineare Potenzgesetzamplitude (definiert in (1.1)), zeigen, verglichen mit den Resultaten (5.34) für das entkoppelte erhaltene Feld [4d] eine noch stärkere Reduktion bezogen auf den klassischen Landau-van Hove ($\epsilon=0$) Wert. Weiterhin finden wir im Unterschied zu (5.34) verschiedene Amplituden für den Feld- bzw. Temperatursprung in 1-Loop-Ordnung.

(*) In diesem Fall kann $\hat{\alpha}$ analytisch aus (5.24) bestimmt werden, vgl. [4d].

Es ist allerdings nicht möglich nach (1.1) eine Amplitude für einen Relaxationsprozess unterhalb T_c ($\tau_f < 0$) zu definieren. In diesem Fall ist nämlich die Abweichung des Ordnungsparameters von seinem Wert im Endgleichgewicht $\delta M(t) = M(t) - M_{sp}(\tau_f)$, an die Korrelationsfunktion $\langle m_q(t) m_{-q}(t) \rangle$ der erhaltenen Größe gekoppelt, mit einer Kopplungskonstante ($\sim M_{sp}(\tau_f)$) die für $\delta M \rightarrow 0$ endlich bleibt. Dies führt dann in 1-Loop-Ordnung zu einem Potenzgesetz des Langzeitverhaltens für $\delta M(t)$ (s. Anhang B). Für $\tau_f > 0$, $h_{\sigma,f} = 0$ ist eine solche Kopplung (in beliebiger Ordnung) allerdings ausgeschlossen, wie in Anhang B durch Symmetrieargumente gezeigt wird.

Bisher gibt es noch keine Messungen mit denen unsere Vorhersagen verglichen werden könnten. Die Systeme [1], die in der Einleitung erwähnt wurden, gehören zu einer verschiedenen Symmetrieklasse (vgl. die Diskussion in [4d]). Die Legierung FeCo [10] gehört zwar zur Klasse der Isingsysteme, aber die Relaxationszeiten sind zu kurz für die bisherigen experimentellen Techniken [16]. Unsere Resultate könnten auch mit Computersimulationen eines Isingsystems mit nächster Nachbarwechselwirkung (antiferromagnetisch) verglichen werden, wenn die Spins auf einem bcc oder einfachkubischen Gitter sitzen (um Frustration zu verhindern) und wenn Spin-Austausch Dynamik [17] vorliegt (mit $\sum_i S_i = N$ in der Zeit erhalten). Wie bereits in Abschnitt 2 erwähnt, sollte die kritische Dynamik dann entweder unserem Modell bzw. dem Modell diskutiert in [4] entsprechen, je nach dem ob $N \neq 0$ oder $N = 0$.

Die vorliegende Arbeit wurde mit Herrn Dr. E. Eisenriegler während eines Aufenthaltes in der KFA Jülich angefertigt und wird in [18] veröffentlicht werden. Unser gemeinsamer Dank gilt Herrn Prof. R. Bausch, Herrn Prof. K. Binder, Herrn Prof. H.K. Janssen und Herrn Dr. R. Folk für viele hilfreiche Diskussionen und Dr. T. Burkhardt für eine kritische Durchsicht unseres Manuskripts.

Ich selbst möchte mich an dieser Stelle sehr herzlich bei Prof. H.G. Schuster bedanken für wichtige Hinweise sowie für die Anregung zu diesem Aufenthalt und den Antrag für die finanzielle Unterstützung durch den SFB Darmstadt. Dem SFB Darmstadt danke ich für die erfolgte finanzielle Unterstützung.

Anhang A

Gleichung (3.6a) folgt aus der Beziehung (zwischen unrenormierten Größen)

$$\int dx' \langle \overset{\circ}{m}(x) [\overset{\circ}{m}(x') - \langle \overset{\circ}{m} \rangle] \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial \overset{\circ}{h}} \langle \overset{\circ}{m}(x) \rangle \right)_{\substack{\text{ooo} \\ \text{UA}\tau}} = 2A \left(\frac{\partial}{\partial \overset{\circ}{r}} \langle \overset{\circ}{m}(x) \rangle \right)_{\substack{\text{ooo} \\ \text{UA}\tau}} \quad (A1)$$

wenn man nach (3.2c), (3.3b,c) die unrenormierten Größen durch renormierte Größen ausdrückt, welche endlich sind für $\epsilon \rightarrow 0$ und wenn man die Struktur (3.4) der Z-Faktoren berücksichtigt.

Um (3.6b) zu erhalten, leiten wir

$$\overset{\circ}{h}_m = \langle \overset{\circ}{m} \rangle + \overset{\circ}{A} \langle \overset{\circ}{\sigma}^2 \rangle \quad (A2)$$

her indem wir die Helmholtzsche Freie Energie ($\overset{\circ}{h}_m = \overset{\circ}{h}_m \{ \langle \overset{\circ}{m}(x) \rangle \}$)

$$- \left[\text{Tr} e^{-\mathcal{H}} \frac{\delta}{\delta \langle \overset{\circ}{m}(x) \rangle} e^{\int dx \overset{\circ}{h}_m (\overset{\circ}{m} - \langle \overset{\circ}{m} \rangle)} \right] / \text{Tr} e^{-\mathcal{H} + \int dx \overset{\circ}{h}_m (\overset{\circ}{m} - \langle \overset{\circ}{m} \rangle)} \quad (A3)$$

auf zwei Arten verwenden: direktes differenzieren ergibt zunächst $\overset{\circ}{h}_m(x)$, die linke Seite von (A2). (Dabei tritt $\delta \overset{\circ}{h} / \delta \langle \overset{\circ}{m} \rangle$ nicht auf, da dieser Ausdruck mit 0 multipliziert wird.) Andererseits kann man $\delta / \delta \langle \overset{\circ}{m} \rangle$ ersetzen durch $-\delta / \delta \overset{\circ}{m}$ in (A3) und erhält dann durch partielle Integration $\langle \delta \mathcal{H} / \delta \overset{\circ}{m}(x) \rangle$, die rechte Seite von (A2). Hier ist zu bemerken, daß $\overset{\circ}{h}_m$ nach (A2) sowohl multiplikativ als auch additiv renormiert werden muß, da $\langle \overset{\circ}{\sigma}^2 \rangle$ als zusammengesetzter Operator in der ϕ -Theorie diese Eigenschaft hat [13].

Aus (A2) folgt mit (3.16), daß

$$\overset{\circ}{\tau} + 2\overset{\circ}{A} \langle \overset{\circ}{m} \rangle = \overset{\circ}{r} - 2\overset{\circ}{A}^2 \langle \overset{\circ}{\sigma}^2 \rangle \quad (A4)$$

nur von $\overset{0}{U}$, $\overset{0}{A}$, $\overset{0}{r}$ abhängt, aber nicht von $\overset{0}{\tau}$. Differenziert man also nach τ mit festem μ , U , A , r (und dementsprechend $\overset{0}{U}$, $\overset{0}{A}$, $\overset{0}{r}$ fest), dann erhält man 0, und somit :

$$0 = \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\tau Z_{\tau} Z_{\sigma}^{-1} + 2A K_D^{-1/2} Z_A Z_{\sigma}^{-1} \langle m \rangle \right)_{\mu, U, A, r} \quad (A5)$$

Da $\partial \langle m \rangle / \partial \tau$ endlich ist für $\epsilon \rightarrow 0$, erhält man schließlich (3.6b) mit (3.4).

Anhang B

Um die lineare Relaxation unterhalb T_c ($\tau_f < 0$, $h_{\sigma,f} = 0$) bis zur 1-Loop-Ordnung zu erhalten, berechnen wir die Abweichungen $\overset{(1)}{a}(t) = (\overset{(1)}{\alpha}, \overset{(1)}{\beta}, \overset{(1)}{\gamma})$ von den Fluktuationen im thermischen Gleichgewicht $\overset{(o)}{a} = (\overset{(o)}{\alpha}, \overset{(o)}{\beta}, \overset{(o)}{\gamma})$ mit der linearisierten Form von (5.8)

$$\left(\frac{1}{2} \partial_t + R^{(o)} \right) \overset{(1)}{a}(t) + \mathcal{M}_O(t) \hat{R}^{(o)} \overset{(1)}{a} = 0 \quad (B1)$$

mit dem Resultat

$$\overset{(1)}{a}(t) = \mathcal{M}_O(0) \cdot \left[\frac{e^{-2tR^{(o)}}}{R^{(o)}} + \frac{e^{-2t\bar{T}^2} - e^{-2tR^{(o)}}}{R^{(o)} - \bar{T}^2} \right] \cdot (-) \hat{R}^{(o)} \overset{(1)}{a} \quad (B2)$$

wobei wir folgende Matrizen eingeführt haben (am Fixpunkt)

$$R^{(o)} = \begin{pmatrix} 2\bar{T}^2 + Q^2, & K^*\bar{T}, & 0 \\ \frac{1}{2} K^*Q^2\bar{T}, & \frac{1}{2}(2\bar{T}^2 + P), & \frac{1}{2} K^*\bar{T} \\ 0, & K^*Q^2\bar{T}, & Q^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{R} = \begin{pmatrix} 6\bar{T}, & K^*, & 0 \\ \frac{1}{2} K^*Q^2, & 3\bar{T}, & \frac{1}{2} K^* \\ 0, & K^*Q^2, & 0 \end{pmatrix} \quad (B3)$$

und die Notation $\mathcal{M}_O^{(o)} \equiv \mathcal{M}_{sp,O} = \sqrt{|\tau_f|} \equiv \bar{T}$. (P ist in (5.16) definiert.) Dann verhält sich das Fluktuationsintegral in (5.1) für große Zeiten $\sim \bar{U} \cdot \mathcal{M}_{sp,O}^2 \cdot t^{-D/2}$, da von den Eigenwerten λ_i von $R^{(o)}$

$$\lambda_1 / \bar{T}^2 = 1 + z^2 \pm \sqrt{1 + K^{*2} \cdot z^2}, \quad \lambda_2 / \bar{T}^2 = 1 + z^2; \quad z \equiv Q/\bar{T} \quad (B4)$$

$\lambda_3 \sim Q^2$ für $Q \rightarrow 0$ ist, entsprechend der zeitlichen Erhaltung von $\gamma_{Q \rightarrow 0}$ und weil der entsprechende Eigenvektor nichtverschwindende Komponenten hat in den Richtungen von α und β .

Für lineare Relaxationsprozesse ins thermische Gleichgewicht oberhalb T_c ($\tau_f > 0$, $h_\sigma = 0$) gibt es kein solches Potenzgesetz. In diesem Fall kommutiert nämlich der Evolutionsoperator L in der Focker Planck Gleichung, die zu (14c,d) äquivalent ist

$$\partial_t P = \sum_q \left\{ \lambda_q \frac{\partial}{\partial \sigma_q} \left[\frac{\partial F_0}{\partial \sigma_{-q}} + \frac{\partial}{\partial \sigma_{-q}} \right] + \lambda_m q^2 \frac{\partial}{\partial m_q} \left[\frac{\partial F_0}{\partial m_{-q}} + \frac{\partial}{\partial m_{-q}} \right] \right\} \cdot P = -LP \quad (B5)$$

Mit der Operation $\sigma \rightarrow -\sigma$, da $F_0 \equiv F(h_\sigma = 0)$ nur gerade Potenzen von σ enthält. Deshalb gehören die Eigenfunktionen von L mit kleinen Eigenwerten (entsprechend der Erhaltung von $m_{q \rightarrow 0}$) zum Unterraum der in σ geraden Funktionen, und deshalb tragen diese Eigenwerte zur Relaxation von $M = \langle \sigma \rangle$ nicht bei.

Literaturhinweise zu Teil IV

- 1 Collins, M.F., Teh, H.C., Phys. Rev. Letters 30, 781 (1973); Hashimoto, T., Miyoshi, T., Ohtsuka, H., Phys. Rev. B13, 1119 (1976)
- 2 Suzuki, M., Intern. J. Magnetism 1, 123 (1971)
- 3 Binder, K., Stauffer, D., Müller-Krumbhaar, H., Phys. Rev. B12, 5261 (1975); Kretschmer, R., Binder, K., Stauffer, D., J. Statistical Physics 15, 267 (1976)
- 4 a) Bausch, R., Janssen, H.K., Z. Physik B25, 275 (1976)
b) Kawasaki, K., Progr. Theoretical Physics 56, 1705 (1976)
c) Yamada, T., Ohta, T., Kawasaki, K., J. Statistical Phys. 16, 281 (1977)
d) Bausch, R., Eisenriegler, E., Janssen, H.K., Z. Physik B 36, 179 (1979)
- 5 Hohenberg, P.C., Halperin, B.I., Rev. Mod. Phys. 49, 435 (1977)
- 6 Brezin, E., De Dominicis, C., Phys. Rev. B12, 4954 (1975); Murata, K.K., Phys. Rev. B13, 2028 (1976)
- 7 Fisher, M.E., Phys. Rev. 176, 257 (1968)
- 8 't Hooft, G., Nuclear Phys. B61, 455 (1973); Lawrie, I.D., J. Phys. A9, 961 (1976); Amit, D., Field Theory, The Renormalization Group and Critical Phenomena, Maidenhead: Mc Graw Hill 1978
- 9 Fisher, M., Rácz, Z., Phys. Rev. B13, 5039 (1976)
- 10 Oyedele, J.A., Collins, M.F., Phys. Rev. B16, 3208 (1977); Rácz, Z., Collins, M.F., Phys. Rev. B21, 229 (1980)
- 11 Bausch, R., Janssen, H.K., Wagner, H., Z. Physik B24, 113 (1976)
- 12 a) Dohm, V., Janssen, H.K., Phys. Rev. Lett. 39, 946 (1977)
b) Dohm, V., JOL Report 1578; available from Zentralbibliothek der KFA Jülich

- 13 Brezin, E., Le Guillou, J.C., Zinn-Justin, J.: Field Theoretical Approach to Critical Phenomena; in: C. Domb and M.S. Green, Vol. VI
- 14 De Dominicis, C., Peleti, L., Phys. Rev. B18, 353 (1978)
- 15 Janssen, H.K., Z. Physik B23, 377 (1976);
De Dominicis, C., J. Physique (Paris) C1, 247 (1976)
- 16 Collins, M.F., private communication
- 17 Kawasaki, K., Phys. Rev. 145, 224 (1966)
- 18 Eisenriegler, E., Schaub, B., to be published in Z. Physik 1980

Erläuterungen zu den Abbildungen

Fig. 1 Anfangs- und Endgleichgewichtszustände für die Relaxationsprozesse.

Fig. 2 Die universellen Potenzgesetze $A_\zeta \cdot (\text{Zeit})^{-\beta_\zeta / \nu_\zeta z_\zeta}$ für die nichtlineare Relaxation der Ordnung bei einfachen binären Legierungen. Die Zeit ist in Einheiten des zweifachen asymptotischen exponentiellen Abfalls (1.1) angegeben.

$\zeta = \text{MF}$: Landau-van Hove Verhalten mit $A_\zeta = 1$, $\beta_\zeta / \nu_\zeta z_\zeta = 0.5$

$\zeta = 0$: Keine Kopplung an das erhaltene Feld mit A_ζ aus (5.34) und $\epsilon = 1$, $z_\zeta \approx 2$, $\beta_\zeta = \beta$, $\nu_\zeta = \nu$.

$\zeta = 1,2$: Endliche Kopplung an das Konzentrationsfeld ($\bar{c} \neq 0$) für den Temperatur- und den Feldsprung (Fig. 1) mit A_ζ aus (5.33) und $\epsilon = 1$, $z_\zeta = 2 + \alpha/\nu$, $\beta_\zeta = \beta$, $\nu_\zeta = \nu$.

α, β, ν sind die üblichen statischen Isingexponenten für $D = 3$.

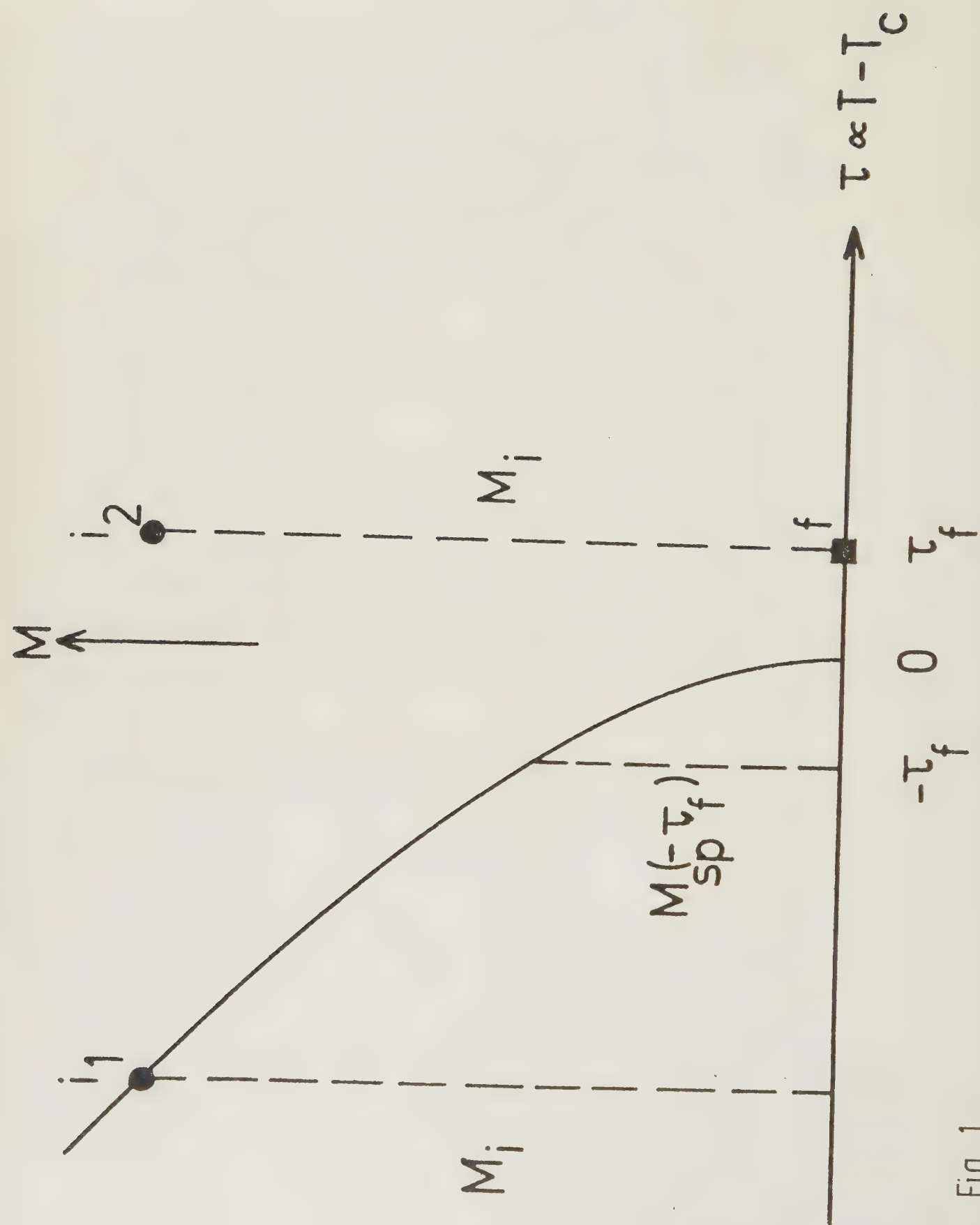


Fig. 1

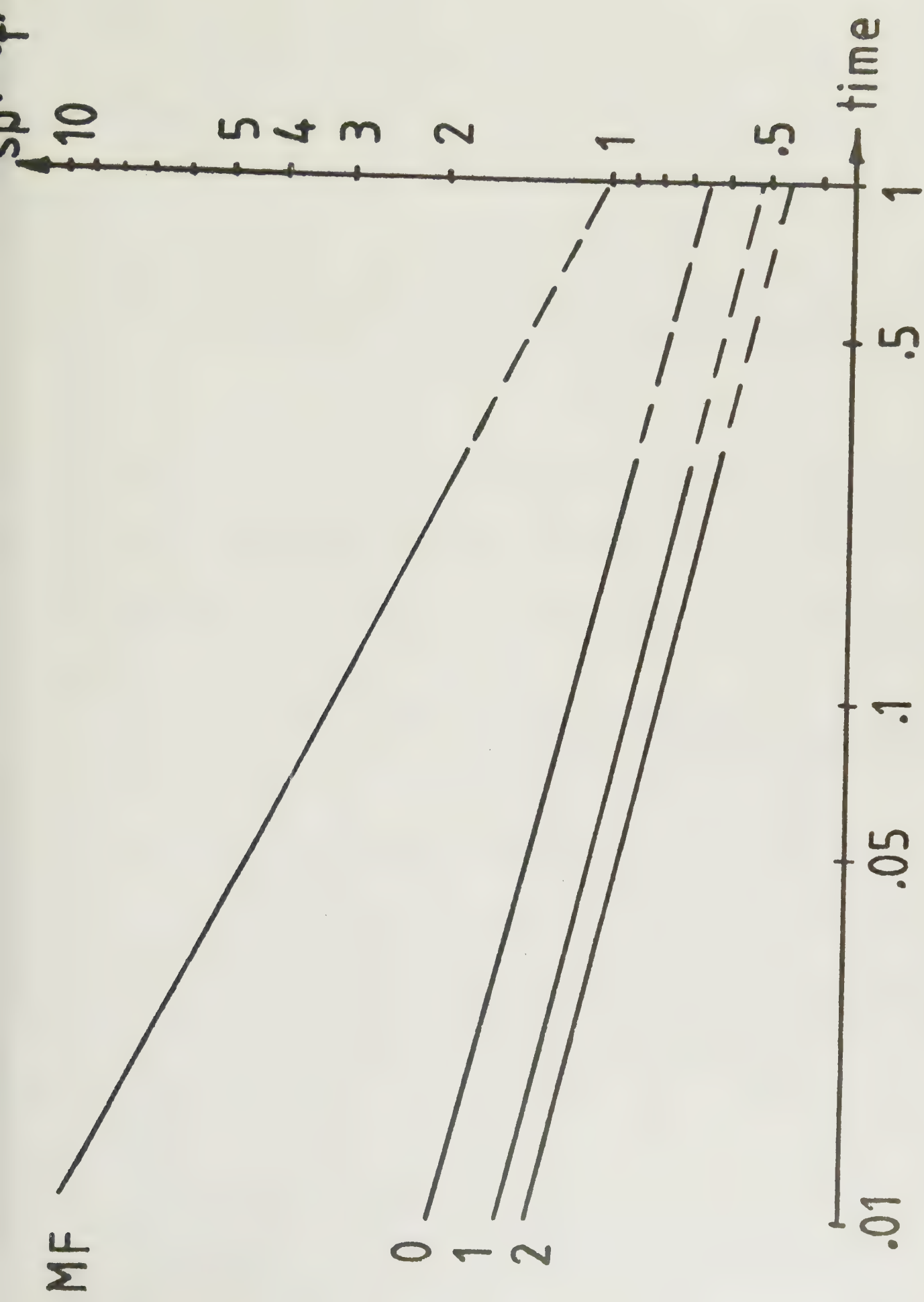


Fig. 2

Herrn Prof. Dr. H.G. Schuster danke ich an dieser Stelle für sein beständiges Interesse an den Problemstellungen dieser Arbeit, für seine zahlreichen wichtigen Anregungen und Hinweise und seinen Antrag auf finanzielle Unterstützung durch den SFB Frankfurt-Darmstadt.

Weiterhin danke ich Herrn Dr. E. Eisenriegler für die Möglichkeit der Mitarbeit an einem wissenschaftlichen Problem während eines Aufenthaltes bei der KFA Jülich, sowie für eine Einführung in die Methoden der Dimensionsregularisierung.

Herrn Dr. R. Liebmann danke ich für viele wichtige Hinweise im Zusammenhang mit den aufgetretenen numerischen Problemen, sowie für ein zur Verfügung gestelltes Computerprogramm.

Schließlich danke ich Herrn Prof. Dr. J. Kötzler für die Übersendung vieler Meßergebnisse vor der Veröffentlichung.

Dem SFB Frankfurt-Darmstadt danke ich für die erfolgte finanzielle Unterstützung.

Bernd Schaub

L E B E N S L A U F

- 31.1.1953 Geboren in Hanau am Main.
 Eltern: Albert und Irma Schaub, geb. Aul
- April 1959 Einschulung - Grundschulbesuch - Schüler des Leibniz-
 gymnasiums in Offenbach (mathematisch-naturwissen-
 schaftlicher Zweig)
 Abitur
- 1971 Beginn des Physikstudiums an der Universität Frankfurt
- 1972 Ableistung des zivilen Ersatzdienstes in Offenbach
- 1973 Fortsetzung des Studiums in Frankfurt
- 1974 Vordiplom
- 1975 Weiterstudium in Bonn, Schwerpunkt Elementarteilchen-
 Physik
- 1977 Beginn einer Diplomarbeit bei Prof. Dr. H.G. Schuster
 in Frankfurt
 Diplomprüfung
- 1978 Beginn der Arbeit an einer Dissertation bei Prof. Dr.
 H.G. Schuster

